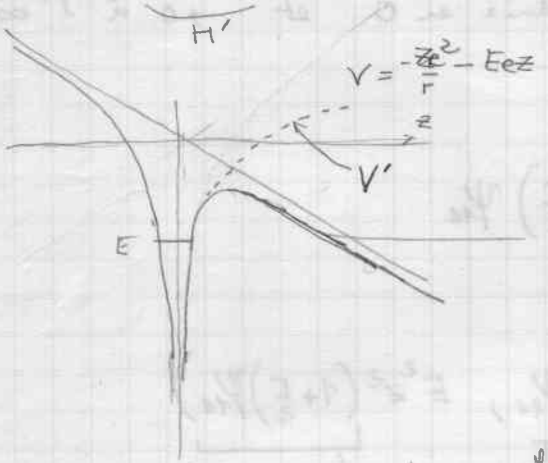
C30

Effet Stark sur 1s de l'hydrogène (Bates I p 178)
(Condon Shortley)

R1 : Niveaux quasi stationnaires

$$H = H_0 \underbrace{- Eez}_{H'}$$



effet tunnel

Pourquoi perturbation donne des résultats significatifs : on aurait des résultats analogues en utilisant V' (fonctions exponentiellement petites dans les régions où V et V' diffèrent)

R2 : $E^{(1)} = 0$

R3 : Calcul de $E^{(2)}$ difficile par résolution spectrale (sommation)

Résolution par fonction perturbée.

$$(H_0 - E_0)\psi_1 = (E_1 - H')\psi_{1s} = eEz\,\psi_{1s}$$

unités atomiques : $e = 1$

$$\psi_{1s} = \frac{2e^{-r}}{\sqrt{4\pi}} \qquad Ez\,\psi_{1s} = E\frac{2e^{-r}}{\sqrt{3}} r\, Y_{10}$$

Cherchons $\psi_1 = \sum_{lm} \varphi_{lm} Y_{lm}$

$$H_0 = -\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{r} \qquad E_0 = 1/2$$

$$\Delta\psi_1 = \sum_{lm}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\varphi_{lm}\right] Y_{lm}$$

→ Seul ϕ_{10} intervient et a a l'équation :

$$\left(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{1}{r} + \frac{1}{r^2} + \frac{1}{2}\right)\phi_{10} = +Ere^{-r}\frac{2}{\sqrt{3}}$$

Comportement à ∞ $\phi_{10} \sim e^{-r}$

" à l'origine $\phi_{10} \sim r$

Posons $\phi_{10} = re^{-r} f(r)$

On obtient : $rf - (2r - r^2)f' - \frac{r^2}{2}f'' = +Er^2\frac{2}{\sqrt{3}}$

Une solution particulière est $f = a + br = + \frac{2E}{\sqrt{3}}\left(1 + \frac{r}{2}\right)$

D'où $\quad \phi_{10} = \frac{+2E}{\sqrt{3}} r\left(1+\frac{r}{2}\right) e^{-r} + \chi \leftarrow$ (Solution de l'éq homogène)

On sait qu'il n'y a pas de sol finie en 0 et $\to 0$ à l'∞ (résolution du spectre de H)

Donc $\chi = 0$

Finalement $\quad \psi_1 = + E z \left(1 + \frac{r}{2}\right) \psi_{1s}$

Correction à l'energie

$$E^{(2)} = \left(\psi_{1s}, \left(H' - E^{(1)}\right)\psi_1\right) = \left(\psi_{1s}, E^2 z^2 \left(1+\frac{r}{2}\right)\psi_{1s}\right)$$

Symétrie sphérique

$$= \left(\psi_{1s}, E^2 \frac{r^2}{3}\left(1+\frac{r}{2}\right)\psi_{1s}\right)$$

$$= \frac{4\pi}{\pi} \frac{E^2}{3} \int_0^\infty r^2 \, r^2 \left(1+\frac{r}{2}\right) e^{-2r} dr$$

$$= -\frac{9E^2}{4}$$

<u>R4</u> 2s et 2p : perturbation dégénérée (ou quasi-dég)

(puis réduit à 1 électron pour simplifier)

Excitation du cortège électronique par $\beta^\pm$ décay du noyau

Ref : • Davydov QM p293 : calcul de $|A_{1s\to 2s}|^2 = w(1s\to 2s)$

$$w(1s\to 2s) = \frac{2^{11}\, Z^3 (Z\pm 1)^3}{(3Z\pm 1)^8} \sim \frac{0{,}312}{Z^2} \quad \text{pour } Z \gg 1$$

$$\left[A_{1s\to 2s} = \int \varphi_{2s}^{(Z\pm 1)*} \varphi_{1s}^{(Z)} d^3r \right]$$

• Migdal & Krainov (Approximation methods of QM) p 66 :

* discussion des effets relatifs de :

α) passage de $e^\pm$ à travers les couches électroniques

$$W_{nm}^{(\alpha)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{\tau} \langle n|W(t)|m\rangle e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2 \sim \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \alpha^2$$

$\tau \sim \frac{a_0}{c}$ (c : vitesse de $e^\pm$) ; $\langle n|W(t)|m\rangle \sim \frac{e^2}{a_0}$; $\omega_{nm} t \ll 1$

β) Variation de Z : $W_{nm}^{(\beta)} \sim \frac{1}{Z^2}$

$$\rightarrow \left\| \frac{W^{(\alpha)}}{W^{(\beta)}} \sim (Z\alpha)^2 \ll 1 \right.$$

* Calcul de la probabilité d'ionisation vers des états très excités $(E \gg |E_0|)$

• Calcul de $w(1s^{(Z)} \to 1s^{(Z\pm1)})$ (hypothèse perturbation brusque)

$$w(1s\to 1s) = \left| \int \varphi_{1s}^{(Z\pm 1)*} \varphi_{1s}^{(Z)} d^3r \right|^2$$

$$\varphi_{1s}^{(Z)} = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}\, Y_{00}$$

$$w = \left[\frac{Z(Z\pm 1)}{(Z\pm \frac{1}{2})^2}\right]^3 = \left(1 - \frac{1}{4(Z\pm\frac{1}{2})^2}\right)^3 \sim 1 - \frac{3}{4Z^2}$$

Donc $\sum_{n\neq 1} w(1s\to ns) \approx \frac{0{,}75}{Z^2}$ (y compris ionisation)