

Groupes et symétries discrets (automne 2007).
Série 10: Impureté dans un champ cristallin.

Considérer un atome avec 1 électron dans la couche externe $3d$ (par exemple le ion Ti^{3+}). Nous allons négliger le spin de l'électron. L'atome est placé comme impureté dans un cristal ayant symétrie T_d (par exemple $CdTe$). La liaison chimique se fait par les électrons dans les orbitaux $3s, 3p$. L'orbital $3d$ ayant un rayon plus petit, ne participe pas à la liaison chimique mais l'électron dans cet orbital subi l'influence du champ électrostatique du cristal qui l'entoure. Nous pouvons considérer l'hamiltonien du système $H = H_0 + V$, où H_0 est l'hamiltonien donnant lieu au niveau $3d$ de l'atome en absence du champ cristallin. V est l'effet du champ cristallin.

- (i) Développer V en série, en utilisant comme base les harmoniques sphériques. Déterminer les éléments de ce développement qui perturbent l'orbital $3d$ (pour cela, décomposer V et les fonctions d'onde de l'orbital $3d$ en représentations irréductibles de T_d). Quel est le rôle de la parité?
- (ii) Déterminer le nombre de niveaux de l'électron $3d$ en présence du champ cristallin et leurs dégénérescences.
- (iii) Considérer une transition à l'ordre de dipôle entre les niveaux ainsi obtenus. Est une telle transition admise par la symétrie T_d ? Et par la parité?