Exercice 1 *Effet photoélectrique sur l'atome d'hydrogène*

1. L'effet d'un champ électromagnétique sur une particule chargée se traduit par le remplacement de $\hat{\mathbf{p}}$ par $\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$ (force de Lorentz). $\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\right)^2$ est l'energie cinétique. $V_c(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ est l'énergie potentielle due au potentiel crée par le noyau de charge e sur l'électron (le potentiel coulombien $\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}$). Comme l'électron possède un spin 1/2, ce spin interagit avec le champ magnétique via le terme $-\mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{S}}$.

2. $\mathbf{B} = \nabla \wedge A$.

3. jauge de Coulomb : $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{0x}\cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) \\ A_{0y}\cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) \\ A_{0z}\cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow A_{0x} d_x \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) + A_{0y} d_y \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) + A_{0z} d_z \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) = 0.$$

$$\Rightarrow -\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) = 0.$$

Les vecteurs $\mathbf{k}_0$ et $\mathbf{A}_0$ sont donc perpendiculaires.

Pour s'entraîner au calcul suivant, pensez au produit $A(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$ appliqué à une fonction d'onde $\psi(x)$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) &= \sum_j \mathbf{A}_j(\hat{\mathbf{r}}, t)\hat{\mathbf{p}}_j - \hat{\mathbf{p}}_j \mathbf{A}_j(\hat{\mathbf{r}}, t) \\
&= \sum_j -i\hbar \mathbf{A}_j(\hat{\mathbf{r}}, t) d_{\hat{\mathbf{r}}_j} + i\hbar(d_{\hat{\mathbf{r}}_j} \mathbf{A}_j(\hat{\mathbf{r}}, t)) + i\hbar \mathbf{A}_j(\hat{\mathbf{r}}, t) d_{\hat{\mathbf{r}}_j} \\
&= -i\hbar \sum_j \mathbf{k_0}_j \mathbf{A}_{0j} \sin(\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega_0 t) \\
&= -i\hbar \sin(\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega_0 t)\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{A}_0 = 0 \qquad (1)
\end{aligned}$$

4. Sans champ électromagnétique, le Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + V_c(\hat{\mathbf{r}}).$$

La perturbation $\hat{V}(t) = \hat{H}(t) - \hat{H}_0$ apportée par rapport au Hamiltonien sans champ électromagnétique est

$$\begin{aligned}
\hat{V}(t) &= \frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) + \frac{e}{2mc}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)^2 - \mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{S}} \\
&= \frac{e}{mc}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)^2 - \mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{S}} \qquad (2)
\end{aligned}$$

5. On se propose ici d'estimer l'ordre de grandeur des différents termes de $\hat{V}$ en fonction de constants fondamentales de la nature comme $\hbar$, e, a_0, m, c et de grandeurs typiques du problème considéré comme l'amplitude du vecteur potentiel $\mathbf{A_0}$ et la longueur du rayonnement λ. On trouve

$$\frac{e}{mc}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}},t)\cdot\hat{\mathbf{p}} \simeq \frac{e\hbar|\mathbf{A}_0|}{mca_0}$$

et on cherche à comparer les autres termes avec ce résultat; on obtient

$$\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}},t)^2 \simeq \frac{e^2|\mathbf{A}_0|^2}{mc^2} \ll \frac{e\hbar|\mathbf{A}_0|}{mca_0}$$

et puis on se rappelle que $\hat{S}_i = \hbar/2\,\hat{\sigma}_i$ et que $\mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}},t) \simeq |\mathbf{k}_0||\mathbf{A}_0| \simeq 1/\lambda|\mathbf{A}_0|$ (pour se convaincre on peut prendre par example une composante de $\mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}},t)$ vu que toutes les composantes d'un vecteur ont les mêmes dimensions. Donc $B_x = d_yA_z - A_yd_z$ et $d_yA_z = -A_{0z}\,k_{0y}\sin(\mathbf{k}_0\cdot\hat{\mathbf{r}} - \omega_0 t)$)

$$\mu_B\mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}},t)\cdot\hat{\mathbf{S}} \simeq \frac{e\hbar|\mathbf{k}_0||\mathbf{A}_0|}{mc} \simeq \frac{e\hbar|\mathbf{A}_0|}{mc\lambda} \ll \frac{e\hbar|\mathbf{A}_0|}{mca_0}$$

On peut donc approximer $\hat{V}(t)$ par $\frac{e}{mc}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}},t)$

6. Le terme en $\delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$ concerne un phénomène pendant lequel l'énergie diminue: $E_f = E_i - \hbar\omega$. C'est le phénomène d'émission stimulée.
Le terme en $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ concerne au contraire un phénomène pendant lequel l'énergie augmente: $E_f = E_i + \hbar\omega$. C'est le phénomène d'absorption stimulée.
Ici, l'énergie initiale est l'énergie minimale, celle de l'état fondamental. Il ne peut donc pas se produire d'émission stimulée et on ne va considérer que le terme d'absorption.

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{mc}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}},t) = \frac{e}{2mc}\mathbf{A}_0\cdot\hat{\mathbf{p}}(e^{i\mathbf{k}_0\cdot\hat{\mathbf{r}} - i\omega_0 t} + e^{-i\mathbf{k}_0\cdot\hat{\mathbf{r}} + i\omega_0 t}).$$

On va donc utiliser la formule de l'énoncé avec $\omega = \omega_0$ et $\hat{V}_\omega = \frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}_0 e^{-i\mathbf{k}_0\cdot\hat{\mathbf{r}}}$, en ne conservant que le terme de droite.

7. Les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ possibles sont ceux tels qu'il existe trois nombres entiers relatifs n_x, n_y et n_z tels que $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$. Ce sont les vecteurs qui vérifient la condition de périodicité. La fonction d'onde normalisée est $|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ et l'énergie $\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$.

8. On choisit comme état $|f\rangle$ la fonction d'une onde plane de vecteur d'onde $\mathbf{k}_f$.

$$\begin{aligned} w_{i\to f} &= \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k}_0\cdot\hat{\mathbf{r}}}|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\left|\int d\mathbf{r}\frac{1}{L^{3/2}}e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}}\frac{e}{2mc}\hbar\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}\right|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) \\ &= \frac{\hbar}{2L^3a_0^3}\left(\frac{e}{mc}\right)^2|\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{A}_0|^2\left|\int d\mathbf{r}e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}e^{-r/a_0}\right|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0) \quad (3) \end{aligned}$$

9. La longueur d'onde est de 100nm ($\lambda \simeq 10^{-7}$m). a_0 est de l'ordre de l'Å($a_0 \simeq 10^{-10}$m). Donc, dans l'intégrale, partout où e^{-r/a_0} n'est pas tout petit, $e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}$ sera très proche de 1.

10. Calculons l'intégrale de la formule précédente :

$$\begin{aligned}
\left|\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} e^{-r/a_0}\right|^2 &\simeq \left|\int d\mathbf{r} e^{-r/a_0 - i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}}\right|^2 \\
&= \left|\int_0^\infty dr r^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{-r/a_0 - ik_f r\cos\theta}\right|^2 \\
&= 4\pi^2 \left|\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-r/a_0} \int_{-1}^1 du e^{-ik_f r u}\right|^2 \\
&= 4\pi^2 \left|\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-r/a_0} \frac{e^{-ik_f r} - e^{ik_f r}}{-ik_f r}\right|^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4\pi^2}{k_f^2}\left|\int_0^\infty dr\, r (e^{-ik_f r - r/a_0} - e^{ik_f r - r/a_0})\right|^2 \\
&= \frac{4\pi^2}{k_f^2}\left|-\int_0^\infty dr \left(\frac{e^{-ik_f r - a_0^{-1} r}}{-ik_f - a_0^{-1}} - \frac{e^{ik_f r - a_0^{-1} r}}{ik_f - a_0^{-1}}\right)\right|^2 \\
&= \frac{4\pi^2}{k_f^2}\left|\frac{1}{(-ik_f - a_0^{-1})^2} - \frac{1}{(ik_f - a_0^{-1})^2}\right|^2 \\
&= \frac{4\pi^2}{k_f^2}\left|\frac{-4ik_f a_0^{-1}}{(-ik_f - a_0^{-1})^2 (ik_f - a_0^{-1})^2}\right|^2 \\
&= \frac{64\pi^2}{a_0^2}\frac{1}{(k_f^2 + a_0^{-2})^4} \qquad (4)
\end{aligned}$$

Insérons le résultat dans $w_{i\to f}$:

$$w_{i\to f} = \frac{32\hbar}{L^3 a_0^5}\left(\frac{e\pi}{mc}\frac{\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{A}_0}{(k_f^2 + a_0^{-2})^2}\right)^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0). \qquad (5)$$

11. On a la relation suivante entre E et $\mathbf{k}$ (de module k) : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Donc, $dE = \frac{\hbar^2 k dk}{m}$. On en déduit les relations inverses :$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $dk = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}} dE$. On part maintenant de

$$\rho(E)dE = \rho(k)dk \qquad (6)$$

$\rho(k)dk$ est le nombre de vecteurs d'onde de module compris entre k et $k + dk$: c'est la surface de la sphère de rayon k, multipliée par dk, divisé par le volume occupé par un vecteur d'onde $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. Au final : $\rho(k)dk = 2\cdot 4\pi k^2 dk \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{m}{\pi^2}\sqrt{2mE}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^3 dE$ avec un facteur 2 qui compte les deux états de polarization du spin. On identifie alors $\rho(E)$:

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi^2}\sqrt{2mE}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^3.$$

Pour obtenir $\rho(E, d\Omega)$, il suffit de multiplier par $\frac{d\Omega}{4\pi}$:

$$\rho(E, d\Omega) = m\sqrt{2mE}\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d\Omega.$$

12. Le produit de la densité d'états finals d'énergie E par unité d'angle solide $d\Omega$ et du taux de transition $i \to f$ par unité de temps ne dépend pas de L comme

$$\rho(E, d\Omega) w_{i \to f} = m\sqrt{2mE} \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right)^3 \frac{8\hbar}{a_0^5} \left(\frac{e\pi}{mc} \frac{\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{A}_0}{(k_f^2 + a_0^{-2})^2} \right)^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_0)\, d\Omega.$$

La dépendance par rapport à l'angle solide intervient dans le terme $|\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{A}_0|^2$. Le taux de transition est plus élevé lorsque $\mathbf{k}_f$ est orienté selon le champ électrique.