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

On s'intéresse à un électron dans un atome d'hydrogène soumis à un bombardement de photons, autrement dit, à un champ électromagnétique. Le Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\right)^2 + V_c(\hat{\mathbf{r}}) - \mu_B \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{S}},$$

où $\hat{\mathbf{p}}$ et $\hat{\mathbf{r}}$ sont les opérateurs impulsion et position, $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur, $\mathbf{B}$ est le champ magnétique, $\mu_B = \frac{e}{2mc}$ le moment magnétique de l'électron et $\hat{\mathbf{S}}$, son opérateur de spin. V_c est l'énergie potentielle coulombienne. On se place dans la jauge de Coulomb et on choisit un champ électromagnétique de vecteur d'onde $\mathbf{k}_0$ et de pulsation ω_0 : $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)$ ($\mathbf{A}_0$ ne dépend ni de la position ni du temps).

1. Interpréter les différents termes du Hamiltonien et donner $V_c(\mathbf{r})$.
2. Donner la relation entre $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$.
3. Quelle est la conséquence du choix de la jauge de Coulomb sur $\mathbf{A}_0$? Calculer $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$.
4. Quelle est la perturbation $\hat{V}(t)$ apportée par rapport au Hamiltonien sans champ électromagnétique ?

On suppose que l'électron est à l'instant initial dans son état fondamental, noté $|i\rangle$, d'énergie E_i donné par la fonction d'onde

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}.$$

On donne l'impulsion caractéristique de l'état fondamental $|\mathbf{p}| \simeq \frac{\hbar}{a_0}$ et la longueur d'onde approximative du rayonnement : $\lambda \simeq 100\text{nm}$. On suppose que l'intensité du rayonnement de photons est faible : $|\mathbf{A}_0| \ll \frac{c\hbar}{ea_0}$.

5. Trouver les ordres de grandeur des différents termes de $\hat{V}$, les comparer et ne garder que le plus important.

On a vu en cours et en exercice que pour une perturbation harmonique :

$$\hat{V}_\omega(t) = \begin{cases} 0 \text{ si t<0} \\ \hat{V}_\omega e^{i\omega t} + \hat{V}_\omega^\dagger e^{-i\omega t} \text{ si t>0} \end{cases},$$

le taux de transition par unité de temps d'un état $|i\rangle$ vers un état $|f\rangle$ d'énergies E_i et E_f est donné par

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(|\langle f|\hat{V}_\omega|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + |\langle f|\hat{V}_\omega^\dagger|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\right). \tag{1}$$

6. Que représentent les deux termes de $w_{i\to f}$? Lequel peut-on supprimer dans notre cas ? Identifier $\hat{V}_\omega$ et ω dans notre situation.

On s'intéresse aux transition de l'état fondamental vers un état libre. Un état libre, par opposition à un état lié, n'est pas confiné près du noyau. On approxime sa fonction d'onde par celle d'une particule libre $\psi(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ainsi que son énergie. Mais on a alors un problème de normalisation qui semble important dans l'équation (1). Pour se débarasser (temporairement) de ce problème, on se place dans une boîte de taille L avec des conditions aux limites périodiques.

7. Quels sont les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ possibles ? Donner la fonction d'onde normalisée pour un vecteur d'onde $\mathbf{k}$, ainsi que l'énergie.

8. Ecrire $w_{i\to f}$ sous forme intégrale pour un état final libre de vecteur d'onde $\mathbf{k}_f$ pour L finie.

9. En utilisant l'ordre de grandeur de la longueur d'onde du champ incident, justifier que l'on peut négliger le facteur dépendant de $\mathbf{k}_0$.

10. Grâce à un passage en coordonnées sphériques, calculer cette intégrale en prenant $\mathbf{k}_f$ selon la direction z en faisant d'abord l'intégrale sur ϕ, puis θ et enfin sur r en s'aidant d'une intégration par partie.

11. Dans la limite où $L \to \infty$, quelle est la densité d'états $\rho(E)$ d'énergie E ? (ne pas hésiter à demander des indications aux assistants en cas de difficulté, mais essayer de se rappeler du cours de physique statistique I avant!) Quelle est la densité d'état $\rho(E, d\Omega)$ d'énergie E et d'impulsion comprise dans l'angle solide $d\Omega$?

12. Vérifier que $\rho(E_f, d\Omega)w_{i\to f}$ ne dépend pas de la taille de la boîte. Expliquer la dépendance de cette quantité par rapport à la fraction d'angle solide choisie.