Mécanique quantique I

Correction séance d'exercices n°10: Effet Zeeman sur la structure fine de l'atome d'hydrogène

.

1. En unités $\hbar = 2m_e = a_0 = e = 1$ on a :

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 1 \Longleftrightarrow 4\pi\epsilon_0 = \frac{1}{2} \\ \alpha &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{2}{c} \\ \frac{dV}{dr} &= \frac{d}{dr}\left(\frac{-1}{4\pi\epsilon_0 r}\right) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{2}{r^2} \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} H &= H_0 + W_{so} + W_Z \\ &= p^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{2}{rc^2}\frac{dV}{dr}\vec{L}.\vec{S} + B(L_z + g_e S_z) \\ &= p^2 - \frac{2}{r} + \frac{\alpha^2}{r^3}\vec{L}.\vec{S} + B(L_z + g_e S_z) \end{aligned}$$

2.
   - On a déjà vu qu'il existe deux ECOC possibles pour H_0: $\{H_0, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ de base $|nlm_l s m_s\rangle$ et $\{H_0, \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z\}$ de base $|nlsjm_j\rangle$.
   - On sait que $\vec{L}\cdot\vec{S}$ ne commute pas avec L_z et S_z, mais par contre il commute avec L^2, J^2, S^2 et J_z, car $\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$. On prendra donc $\{H_0 + W_{so}, \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z\}$ de base $|nlsjm_j\rangle$ comme ECOC. Pour simplifier les notations on pose $|...\rangle_{so} = |nlsjm_j\rangle$.
   - Cette fois-ci, on prend $\{H_0 + W_Z, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ de base $|nlm_l s m_s\rangle$ comme ECOC, car W_Z ne commute pas avec $\vec{J}^2$ et J_z. Pour simplifier les notations on pose $|...\rangle_Z = |nlm_l s m_s\rangle$.

3. Les niveaux d'énergie de l'hamiltonien $H = H_0 + W$ (où H_0 est l'hamiltonien non-perturbé et W et une perturbation) au premier ordre sont

$$E_n = E_{0n} + \langle\psi_{0n}|W|\psi_{0n}\rangle$$

où E_{0n} et $|\psi_{0n}\rangle$ sont l'énergie et le vecteur propre de H_0 qui correspondent au nombre quantique principale n. Ce nombre quantique est défini pour H_0, mais on

http://quic.ulb.ac.be , ahertz@ulb.ac.be

peut considérer qu'il reste valable tant que E_n ne dffière pas beaucoup de E_{0n} et donc ne peut pas être confondue avec d'autres niveaux d'énergie, c'est-à-dire quand

$$|\langle\psi_{0n}|W|\psi_{0n}\rangle| \ll |E_{0n} - E_{0n'}|.$$

Pour des nombres quantiques d'ordre 1, l est également d'ordre 1, s vaut $\pm 1/2$ et r est d'ordre a_0 c'est à dire d'ordre 1. On a donc :

- $H_0 = p^2 - \frac{2}{r}$ est d'ordre 1.
- $W_{so} = \frac{\alpha^2}{r^3}\vec{L}.\vec{S}$ est d'ordre $\alpha^2 \simeq \frac{1}{137^2} \simeq 5,33.10^{-5} \simeq 10^{-5}$.
- $W_Z = B(L_z + g_e S_z)$ est d'ordre B.

De façon générale, on a donc $H_0 \gg W_{so}$ et $H_0 \gg W_Z$ car B est en générale d'ordre 10^{-5} ($\simeq 1T$). [1]

Ainsi, aussi bien W_{so} que W_Z peuvent être traité comme une perturbation. On a vu à la question précédente qu'il n'y a pas d'ECOC commun à H, W_Z et W_{SO}. Toutefois, en utilisant la base propre de $H + W_{so}$, on peut résoudre complètement ce système en le diagonalisant et on considère alors W_Z comme une perturbation. De la même façcon, on peut diagonaliser $H_0 + W_Z$ en exprimant cet hamiltonien dans sa base propre et on considère W_{so} comme la perturbation.

4. - Énergies exactes spin-orbite :

$$\begin{aligned}
\langle H_0 + W_{so}\rangle_{so} &= \langle nlsjm_j|(H_0 + \frac{\alpha^2}{r^3}\vec{L}.\vec{S})|nlsjm_j\rangle \\
&= \langle nlsjm_j|\left(E_n + \frac{\alpha^2}{2r^3}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)\right)|nlsjm_j\rangle \\
&= \langle n|E_n|n\rangle\langle lsjm_j|lsjm_j\rangle + \frac{\alpha^2}{2}\langle lsjm_j|(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)|lsjm_j\rangle\langle n|r^{-3}|n\rangle \\
&= -\frac{1}{n^2} + \frac{\alpha^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\langle r^{-3}\rangle_{so} \qquad (1)
\end{aligned}$$

Dans ce calcul, on a mis en évidence que E_n n'agit que sur la partie $|n\rangle$ des états tout comme r^{-3}, alors que J^2, L^2 et S^2 eux agissent sur les états de la base couplée $|lsjm_s\rangle$.

On a également posé $\langle r^{-3}\rangle_{so} = \langle n|r^{-3}|n\rangle$. Son calcul sera fait dans la correction de la question 6.

Finalement, on note qu'on a calculé que les éléments de matrice diagonaux. En effet, puisque les états $|nlsjm_j\rangle$ sont vecteurs propres de $H_0 + \frac{\alpha^2}{r^3}\vec{L}\cdot\vec{S}$, tous les autres éléments matriciels seront nuls.

[1] Pour comparaison, les appareils d'imagerie médicale par résonance magnétique (IRM) n'atteignent que $3T$. En 2011, une équipe du laboratoire national de Los Alamos, aux États-Unis, a annoncé d'avoir battu un record d'intensité pour un champ magnétique, soit 97,4 Tesla.

- Énergies exactes Zeeman :

$$\begin{aligned}\langle H_0 + W_Z\rangle_Z &= \langle nlm_lsm_s|(H_0 + B(L_z + g_eS_z))|nlm_lsm_s\rangle \\ &= \langle n|E_n|n\rangle\langle lm_lsm_s|lm_lsm_s\rangle + \langle n|n\rangle\langle lm_lsm_s|B(L_z + g_eS_z)|lm_lsm_s\rangle \\ &= -\frac{1}{n^2} + B(m_l + g_em_s) \qquad (2)\end{aligned}$$

Encore une fois, on a mis en évidence ici que E_n n'agit que sur la partie $|n\rangle$ des états alors que $B(L_z + g_eS_z)$ n'agit que sur les états de la base découplée $|lm_lsm_s\rangle$.

Ici aussi, tous les éléments non diagonaux seront nuls.

5. - **Correction Zeeman (on traite W_Z comme la perturbation)**:

Il faut utiliser la même base que celle de l'ECOC de $H_0 + W_{SO}$!

$$\langle W_Z\rangle_{so} = \langle nlsjm_j|(B(L_z + g_eS_z))|nlsjm_j\rangle$$

Pour cela, on exprime les $|nlsjm_j\rangle$ en fonction des $|nlm_lsm_s\rangle$ par l'intermédiaire des coefficients de Clebsh-Gordan :

$$|nlsjm_j\rangle = \sum_{m_l,m_s} \langle m_lm_s|jm_j\rangle|nlm_lsm_s\rangle \qquad (3)$$

Rappelons que dans le cas du couplage entre un moment cinétique orbital l et un spin 1/2 on a

$$\begin{aligned}|l - 1/2| \leq\ & j \leq l + 1/2, \\ -j \leq\ & m_j \leq j, \\ m_j =\ & m_l + m_s\end{aligned}$$

La dernière équation détermine m_j en fonction de m_l et m_s. Plus précisément, lorsqu'on écrit un certain état de la base couplée qui a un certain m_j, il s'exprime comme une combinaison linéaire des états de la base découplée. Mais ces états ne sont pas quelconques. Il sont tels que la somme de leur m_l et m_s donnera toujours m_j.

Examinons les différentes situations. Petit rappel, l est toujours compris entre 0 et $n-1$. Ainsi, si $n-1$, l ne peux valoir que 0 et si $n = 2$, l peut valoir 0 ou 1.

<u>Cas 1s :</u> $n = 1$, $l = 0$ et $s = 1/2$.

Puisque $|l - 1/2| \leq j \leq l + 1/2$, on a forcément $j = 1/2$. De plus, puisque $-j \leq m_j \leq j$, il y a deux valeurs possible de m_j: $m_j = \pm 1/2$. Il n'y aura donc que deux états dans la base couplée $|lsjm_j\rangle$:$|0\,1/2\,1/2\,1/2\rangle$ et $|0\,1/2\,1/2\,-1/2\rangle$.

Maintenant, on se souvient que lorsqu'on écrit les états de la base couplée comme une combinaison linéaire des états de la base découplée on doit toujours respecter $m_j = m_l + m_s$. De plus, comme $l = 0$, la seule valeur de m_l possible est 0 et comme $s = 1/2$, on a m_s qui vaut 1/2 ou $-1/2$. Ainsi, si $m_j = 1/2$, la seule possibilité est d'avoir $m_l = 0$ et $m_s = 1/2$ et i $m_j = -1/2$, la seule possibilité est d'avoir $m_l = 0$ et $m_s = -1/2$. Les états de la base découplée, dans ce cas-ci s'expriment tout simplement comme

$$|0\ 1/2\ 1/2\ 1/2\rangle_c = |0\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle \quad \text{et} \quad |0\ 1/2\ 1/2\ -1/2\rangle_c = |0\ 0\ 1/2\ -1/2\rangle$$

ATTENTION, notez bien que le premier ket à gauche de l'égalité est écrit dans la base couplée $|l\ s\ j\ m_j\rangle$ (d'ou l'indice c) alors que celui de droite est écrit dans la base découplée $|l\ m_l\ s\ m_s\rangle$

On peut maintenant calculer la perturbation

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{1s\ \frac{1}{2}} &= \langle W_Z\rangle_Z = \langle 0\ 1/2\ 1/2\ 1/2|_c(B(L_z + g_e S_z))|0\ 1/2\ 1/2\ 1/2\rangle_c \\
&= \langle 0\ 0\ 1/2\ 1/2|(B(L_z + g_e S_z))|0\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle \\
&= B(0 + g_e 1/2)\langle 0\ 0\ 1/2\ 1/2|0\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle \\
&= \frac{g_e B}{2}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{1s\ -\frac{1}{2}} &= \langle W_Z\rangle_Z = \langle 0\ 1/2\ 1/2\ -1/2|_c(B(L_z + g_e S_z))|0\ 1/2\ 1/2\ -1/2\rangle_c \\
&= \langle 0\ 0\ 1/2\ -1/2|(B(L_z + g_e S_z))|0\ 0\ 1/2\ -1/2\rangle \\
&= B(0 - g_e 1/2)\langle 0\ 0\ 1/2\ -1/2|0\ 0\ 1/2\ -1/2\rangle \\
&= -\frac{g_e B}{2}.
\end{aligned}$$

Notez qu'on utilise la notation 1s pour se rappeler qu'on est ici dans le cas $n = 1$.

<u>Cas 2s :</u> $n = 2$, $l = 0$ et $s = 1/2$.

Comme on a les mêmes valeurs de l, s que dans le cas 1s, on aura exactement les mêmes résultats. La différence ici est que $n = 2$.

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{2s\ \frac{1}{2}} &= \frac{g_e B}{2}. \\
\langle W_Z\rangle_{2s\ -\frac{1}{2}} &= -\frac{g_e B}{2}.
\end{aligned}$$

<u>Cas 2p :</u> $n = 2$, $l = 1$ et $s = 1/2$.

Cette fois-ci, puisque $l = 1$, il existe deux valeurs possible pour j, $j = 1/2$ avec $m_j = \pm 1/2$ et $j = 3/2$ avec $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2$. Pour écrire les différents états de la base couplée (il y en aura 6 : deux pour $j = 1/2$ et deux pour $j = 3/2$), on utilise l'équation (3).

On calcule les coefficients de Clebsh-Grodan $\langle m_l m_s|j m_j\rangle$ à l'aide du tableau suivant (voir TP 7)) :

j \ m_s	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$l + \frac{1}{2}$	$\left(\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}$
$l - \frac{1}{2}$	$-\left(\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}$

Rappelez vous que pour toutes les cases du tableau on a une seule valeur de m_j. On en déduit ensuite la valeur de m_l puisque $m_j = m_l + m_s$.

Commençons par calculer l'état de la base couplée pour lequel $j = 3/2$ et $m_j = 3/2$. Dans ce cas, on commence par écrire le tableau pour $m_j = 3/2$:

j \ m_s	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
3/2	1	0
1/2	0	1

Comme $j = 3/2$, on ne regarde que la première ligne. On voit directement qu'il n'y aura qu'un seul état de la base découplée, celui qui a $m_s = 1/2$. On en déduit bien-sûr que $m_l = m_j - m_s = 1$ et on a donc (encore une fois, le premier ket est dans la base couplée $|l\ s\ j\ m_j\rangle$ et le deuxième dans la base découplée $|l\ m_l\ s\ m_s\rangle$)

$$|1\ 1/2\ 3/2\ 3/2\rangle_c = |1\ 1\ 1/2\ 1/2\rangle$$

Notez qu'un état tel que $j = 1/2$ et $m_j = 3/2$ n'est pas possible et donc la deuxième ligne du tableau est inutile ici.

De la même façon, on peut écrire le tableau pour $m_j = -3/2$:

j \ m_s	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
3/2	0	1
1/2	1	0

et on peut directement écrire l'état qui a $j = 3/2$ et $m_j = -3/2$ ($m_l = m_j - m_s = -3/2 + 1/2 = -1$):

$$|1\ 1/2\ 3/2\ -3/2\rangle_c = |1\ -1\ 1/2\ -1/2\rangle$$

On écrit maintenant le tableau pour $m_j = 1/2$:

j \ m_s	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
3/2	$\sqrt{2/3}$	$\sqrt{1/3}$
1/2	$-\sqrt{1/3}$	$\sqrt{2/3}$

Cette fois-ci, chaque état de la base couplée s'écrira comme une combinaison de deux états de la base découplée. La première ligne nous donne la coefficient pour l'état avec $j = 3/2$ et la deuxième ligne pour l'état avec $j = 1/2$. on a donc:

$$|1\ 1/2\ 3/2\ 1/2\rangle_c = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 1\ 1/2\ -1/2\rangle$$

$$|1\ 1/2\ 1/2\ 1/2\rangle_c = -\sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 1\ 1/2\ -1/2\rangle$$

Finalement, on écrit le tableau pour $m_j = -1/2$:

j \ m_s	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$3/2$	$\sqrt{1/3}$	$\sqrt{2/3}$
$1/2$	$-\sqrt{2/3}$	$\sqrt{1/3}$

et on obtient les états suivants:

$$|1\ 1/2\ 3/2\ \ -1/2\rangle_c = \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ \ -1\ 1/2\ 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 0\ 1/2\ \ -1/2\rangle$$

$$|1\ 1/2\ 1/2\ \ -1/2\rangle_c = -\sqrt{\frac{2}{3}}|1\ \ -1\ 1/2\ 1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 0\ 1/2\ \ -1/2\rangle$$

On obtient alors les corrections Zeeman suivantes (les indices définissent l'orbitale 2p puis les valeurs de j et de m_j):

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}} &= \langle W_Z\rangle_Z = \langle 1\ 1/2\ 3/2\ 3/2|_c(B(L_z+g_eS_z))|1\ 1/2\ 3/2\ 3/2\rangle_c \\
&= \langle 1\ 1\ 1/2\ 1/2|(B(L_z+g_eS_z))|1\ 1\ 1/2\ 1/2\rangle \\
&= B(1+g_e1/2)\langle 1\ 1\ 1/2\ 1/2|1\ 1\ 1/2\ 1/2\rangle \\
&= B+\frac{g_eB}{2}.
\end{aligned}$$

$$\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{3}{2}\ -\frac{3}{2}} = -B-\frac{g_eB}{2}$$

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}} &= \langle W_Z\rangle_Z = \langle 1\ 1/2\ 3/2\ 1/2|_c(B(L_z+g_eS_z))|1\ 1/2\ 3/2\ 1/2\rangle_c \\
&= \frac{2}{3}\langle 1\ 0\ 1/2\ 1/2|(B(L_z+g_eS_z))|1\ 0\ 1/2\ 1/2\rangle \\
&\quad +\frac{1}{3}\langle 1\ 1\ 1/2\ \ -1/2|(B(L_z+g_eS_z))|1\ 1\ 1/2\ \ -1/2\rangle \\
&= \frac{2}{3}Bg_e1/2+\frac{1}{3}(B-Bg_e1/2) \\
&= \frac{B}{3}\left(1-\frac{g_e}{2}+g_e\right)
\end{aligned}$$

$$\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}} = \frac{B}{3}\left(-1+\frac{g_e}{2}-g_e\right)$$

$$\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}} = \frac{2B}{3}\left(1-\frac{g_e}{2}+\frac{g_e}{4}\right)$$

$$\langle W_Z\rangle_{2p\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}} = \frac{B}{3}\left(-1+\frac{g_e}{2}-\frac{g_e}{4}\right)$$

- <u>**Correction spin-orbite (on traite W_SO comme la perturbation)**</u>:
Il faut utiliser la même base que celle de l'ECOC de $H_0 + W_Z$!

$$\begin{aligned}
\langle W_{so}\rangle_Z &= \langle nlm_l sm_s| \left(\frac{\alpha^2}{r^3}\vec{L}.\vec{S}\right)|nlm_l sm_s\rangle \\
&= \langle nlm_l sm_s| \left(\frac{\alpha^2}{r^3}\left(\frac{L_+.S_- + L_-.S_+}{2} + L_z.S_z\right)\right)|nlm_l sm_s\rangle \\
&= \alpha^2\left(\langle nlm_l sm_s|\frac{L_+.S_-}{2r^3}|nlm_l sm_s\rangle\right. \\
&+ \left.\langle nlm_l sm_s|\frac{L_-.S_+}{2r^3}|nlm_l sm_s\rangle + \langle nlm_l sm_s|\frac{L_z.S_z}{r^3}|nlm_l sm_s\rangle\right) \\
&= \alpha^2\left(C_1\langle nlm_l s(m_s+1)|\frac{1}{r^3}|nl(m_l+1)sm_s\rangle\right. \\
&+ \left.C_2\,\langle nlm_l s(m_s-1)|\frac{1}{r^3}|nl(m_l-1)sm_s\rangle + m_l m_s\langle nlm_l sm_s|\frac{1}{r^3}|nlm_l sm_s\rangle\right) \\
&\qquad avec\ C_1 = \frac{\sqrt{l(l+1)-m_l(m_l+1)}\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-m_s(m_s+1)}}{2} \\
&\qquad et\ C_2 = \frac{\sqrt{l(l+1)-m_l(m_l-1)}\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-m_s(m_s-1)}}{2} \\
&= \alpha^2\left(C_1\langle lm_l s(m_s+1)|l(m_l+1)sm_s\rangle\right. \\
&+ \left.C_2\,\langle lm_l s(m_s-1)|l(m_l-1)sm_s\rangle + m_l m_s\right)\langle n|\frac{1}{r^3}|n\rangle \\
&= \alpha^2 m_l m_s\langle n|\frac{1}{r^3}|n\rangle = \alpha^2 m_l m_s\int_0^\infty R^*_{n_r l}\frac{1}{r^3}R_{n_r l}r^2\,dr \\
&= \alpha^2 m_l m_s\int_0^\infty \frac{|R_{n_r l}|^2}{r}dr
\end{aligned}$$

Notez bien ici que $\frac{1}{r^3}$ n'agit que sur la partie $|n\rangle$, ce qui nous permet de le mettre en évidence.

<u>Cas 1s :</u> $n = 1$ et $l = 0$ donc $n_r = l = 0$ car $n = n_r + l + 1$ (cf. Rappel).

$$\begin{aligned}
\langle W_{so}\rangle_Z &= \alpha^2 m_l m_s\int_0^\infty \frac{|R_{00}|^2}{r}dr \\
&= 0 \text{ car } m_l = 0
\end{aligned}$$

<u>Cas 2s :</u> $n = 2$ et $l = 0$ donc $n_r = 1$

$$\begin{aligned}
\langle W_{so}\rangle_Z &= \alpha^2 m_l m_s\int_0^\infty \frac{|R_{10}|^2}{r}dr \\
&= 0 \text{ car } m_l = 0
\end{aligned}$$

<u>Cas 2p :</u> $n = 2$ et $l = 1$ donc $n_r = 0$

$$\langle W_{so}\rangle_Z = \alpha^2 m_l m_s\int_0^\infty \frac{|R_{01}|^2}{r}dr$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\alpha^2}{2} m_l m_s \int_0^\infty \frac{r e^{-r} |{}_1F_1(0,4,r)|^2}{24} dr \\
&= \alpha^2 m_l m_s \int_0^\infty \frac{1}{24} r e^{-r} dr \\
&= \alpha^2 m_l m_s \frac{1}{24} \Gamma(2) \\
&= \frac{\alpha^2}{24} m_l m_s
\end{aligned}$$

6. Les énergies au premier ordre sont données par les énergies exactes auxquelles on additionne les corrections au premier ordre.

   - **Énergies exactes spin-orbite** dans les cas $n = 1$ et $n = 2$, d'après la relation (1):
     - Cas 1s : $n = 1$, $l = 0$ et $s = 1/2$ donc $j = s = 1/2$ et le deuxième terme de (1) s'annule.

       $$E^{so}_{1s\pm} = -1.$$

     - Cas 2s : $n = 2$, $l = 0$ et $s = 1/2$ donc $j = s = 1/2$ et le deuxième terme de (1) s'annule aussi.

       $$E^{so}_{2s\pm} = -\frac{1}{4}.$$

     - Cas 2p : $n = 2$, $l = 1$ et $s = 1/2$ donc il existe 2 valeurs possibles pour j : $j = 1/2$ et $j = 3/2$. Dans chaque cas, $\langle r^{-3}\rangle_{so}$ prend la même valeur car il ne dépend que de n et de l ou de manière équivalente de n_r et de l. En particulier dans le cas 2p, $n_r = n - l - 1 = 0$ et

       $$\begin{aligned}
       \langle r^{-3}\rangle_{so} &= \int_0^\infty R^*_{01}(r) \frac{1}{r^3} R_{01}(r) r^2 dr = \int_0^\infty \frac{|R_{01}(r)|^2}{r} dr \\
       &= \int_0^\infty \frac{r e^{-r} |{}_1F_1(0,4,r)|^2}{24} dr = \int_0^\infty \frac{r e^{-r}}{24} dr = \frac{1}{24}
       \end{aligned}$$

       Ainsi :

       $$\begin{aligned}
       E^{so}_{2p\frac{3}{2}} &= -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48}. \\
       E^{so}_{2p\frac{1}{2}} &= -\frac{1}{4} - \frac{\alpha^2}{24}.
       \end{aligned}$$

   - **Énergies exactes Zeeman** dans les cas $n = 1$ et $n = 2$, d'après la relation (2):
     - Cas 1s : $n = 1$, $l = 0$ et $s = 1/2$.

       $$E^{Z}_{1s\pm} = -1 \pm \frac{g_e B}{2},$$

– <u>Cas 2s :</u> $n = 2$, $l = 0$ et $s = 1/2$.

$$E^Z_{2s\pm} = -\frac{1}{4} \pm \frac{g_e B}{2}$$

– <u>Cas 2p :</u> $n = 2$, $l = 1$ et $s = 1/2$.

$$\begin{aligned} E^Z_{2p+\pm} &= -\frac{1}{4} + B(1 \pm \frac{g_e}{2}) \\ E^Z_{2p0\pm} &= -\frac{1}{4} \pm \frac{g_e B}{2} \\ E^Z_{2p-\pm} &= -\frac{1}{4} - B(1 \mp \frac{g_e}{2}) \end{aligned}$$

* <u>Si $B \to 0$:</u>
Si $B \to 0$, alors bien sûr on a $B \ll H_0$, mais en plus $W_Z \ll W_{SO}$. On choisira donc W_Z comme perturbation. Les énergies finales sont donc:

- $E_{1s\pm\frac{1}{2}} = -1 \pm \frac{g_e B}{2} = -1 \pm B \to -1$
- $E_{2s\pm\frac{1}{2}} = -\frac{1}{4} \pm \frac{g_e B}{2} = -\frac{1}{4} \pm B \to -1$
- $E_{2p\frac{3}{2}\pm\frac{3}{2}} = -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48} + B\left(\pm 1 \pm \frac{g_e}{2}\right) = -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48} \pm 2B \to -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48}$
- $E_{2p\frac{3}{2}\pm\frac{1}{2}} = -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48} + \frac{B}{3}\left(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2} + g_e\right) = -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48} \pm \frac{2B}{3} \to -\frac{1}{4} + \frac{\alpha^2}{48}$
- $E_{2p\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} = -\frac{1}{4} - \frac{\alpha^2}{24} + \frac{2B}{3}\left(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2} + \frac{g_e}{4}\right) = -\frac{1}{4} - \frac{\alpha^2}{24} \pm \frac{B}{3} \to -\frac{1}{4} - \frac{\alpha^2}{24}$

* <u>Si $B \to \infty$:</u>
Si $B \to \infty$, alors cette fois-ci $B \gg H_0$, C'est donc forcément W_{SO} qui sera la perturbation. Les énergies finales sont donc:

- $E_{1s\pm} = -1 \pm \frac{g_e B}{2} = -1 \pm B \to \pm B$
- $E_{2s\pm} = -\frac{1}{4} \pm \frac{g_e B}{2} = -\frac{1}{4} \pm B \to \pm B$
- $E_{2p+\pm} = -\frac{1}{4} + B\left(1 \pm \frac{g_e}{2}\right) \pm \frac{\alpha^2}{48} = -\frac{1}{4} + B(1 \pm 1) \pm \frac{\alpha^2}{48} \to (1 \pm 1)B$
- $E_{2p0\pm} = -\frac{1}{4} \pm \frac{g_e B}{2} = -\frac{1}{4} \pm B \to \pm B$
- $E_{2p-\pm} = -\frac{1}{4} - B\left(1 \mp \frac{g_e}{2}\right) \mp \frac{\alpha^2}{48} = -\frac{1}{4} - B(1 \mp 1) \mp \frac{\alpha^2}{48} \to -(1 \mp 1)B$

7. Dans les cas limites $B \to 0$ et $B \to \infty$ les états propres à l'ordre zéro sont respectivement les états $|nlsjm_j\rangle$ et $|nlm_l sm_s\rangle$.

   On remarque que quand $B \to 0$ on aura des dégénérescences. L'effet Zeemann (rajouter un champ B) a donc pour but d'éliminer ces dégénérescences en séparant les niveaux d'énergie.

   Quand $B \to \infty$ la contribution de l'interaction du moment orbital et du spin avec le champ magnétique est le plus important, mais il peut s'annuler si les projections du moment orbital et du spin ont les signes opposées.