Mécanique quantique I

Correction séance d'exercices n°11: Effet Zeeman sur la structure fine de l'atome d'hydrogène

.

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

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

   Ainsi,

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

   A partir de l'expression de la force de Lorentz $\vec{F} = q\vec{v} \wedge \vec{B}$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow [B] &= \frac{[F]}{[Q][V]} = \frac{[F][T]}{[Q][L]} = \frac{[F][L][T]}{[Q][L]^2} = \frac{[Action]}{[Q][L]^2} \\ \text{Unité de B} &= \frac{\hbar}{ea_0^2} \simeq 2,3.10^5 T \end{aligned}$$

2. Pour des nombres quantiques d'ordre 1 (typiquement $1 \leq n \leq 10$), 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 $\alpha^2 \simeq \frac{1}{137^2} \simeq 5,33.10^{-5} \simeq 10^{-5}$.

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

- $W_Z = B(L_z + g_e S_z)$ est d'ordre B.

De ce fait, 2 cas se présente :

* $\underline{W_Z \ll W_{so}}$: C'est à dire quand le champs B est d'ordre inférieur à 10^{-5} c'est à dire inférieur à 0.2 T. Dans ce cas W_Z peut être traité comme une perturbation de l'hamiltonien $H_0 + W_{so}$.

* $\underline{W_Z \gg W_{so}}$: C'est à dire quand le champs B est d'ordre supérieur à 10^{-5} c'est à dire supérieur à 20 T. Dans ce cas W_{so} peut être traité comme une perturbation de l'hamiltonien $H_0 + W_Z$.

3.
- 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 $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(j^2 - l^2 - s^2)$. 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 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 on pose $|...\rangle_Z = |nlm_l s m_s\rangle$.

4.
- Énergies exactes spin-orbite :

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

- énergies exactes Zeeman :

$$\begin{aligned}
\langle H_0 + W_Z\rangle_Z &= \langle nlm_l s m_s|(H_0 + B(L_z + g_e S_z))|nlm_l s m_s\rangle \\
&= -\frac{1}{n^2} + B(m_l + g_e m_s) \qquad (2)
\end{aligned}$$

5.
- Correction Zeeman (on traite W_Z comme la perturbation):
Il faut utiliser la même base que celle de l'ECOC de $H_0 + W_{SO}$!

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

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

$$|nlsjm_j\rangle = \sum_{m_l,m_s} \langle m_l m_s|jm_j\rangle |nlm_lsm_s\rangle \text{ pour } m_l + m_s = m_j \quad (3)$$

Dans le cas du couplage entre un moment cinétique orbital L et un spin 1/2 (cf. exercices 10), les coefficients s'expriment

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

Cas 1s : $n = 1$, $l = 0$ et $s = 1/2$. Donc seul $j = 1/2$ existe avec $m_j = \pm 1/2$. Ainsi les deux seuls êtats s'expriment simplement comme $|1s\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle = |m_s = \pm 1/2\rangle$. On a donc,

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

Cas 2s : $n = 2$, $l = 0$ et $s = 1/2$. Donc de la même manière que dans le cas 1s, seuls les êtats $|2s\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle = |m_s = \pm 1/2\rangle$ existent avec $j = 1/2$ et $m_j = \pm 1/2$.

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

Cas 2p : $n = 2$, $l = 1$ et $s = 1/2$. Il existe donc deux valeurs pour j, $j = 1/2$ avec $m_j = \pm 1/2$ et $j = 3/2$ avec $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2$. De (3), on obtient les 6 êtats suivants :

$$\begin{aligned}
|2p\frac{3}{2} \pm \frac{3}{2}\rangle &= |m_l = \pm 1, m_s = \pm 1/2\rangle \\
|2p\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l = \pm 1, m_s = \mp 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l = 0, m_s = \pm 1/2\rangle \\
|2p\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle &= \pm\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l = \pm 1, m_s = \mp 1/2\rangle \mp \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l = 0, m_s = \pm 1/2\rangle
\end{aligned}$$

On obtient les corrections Zeeman suivantes:

$$\begin{aligned}
\langle W_Z\rangle_{2p\frac{3}{2}\pm\frac{3}{2}} &= B(\pm 1 \pm \frac{g_e}{2}) \\
\langle W_Z\rangle_{2p\frac{3}{2}\pm\frac{1}{2}} &= \frac{1}{3}B(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2}) + \frac{2}{3}B(0 \pm \frac{g_e}{2}) = \frac{B}{3}(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2} \pm g_e) \\
\langle W_Z\rangle_{2p\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}} &= \frac{2}{3}B(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2}) + \frac{1}{3}B(0 \pm \frac{g_e}{2}) = \frac{2B}{3}(\pm 1 \mp \frac{g_e}{2} \pm \frac{g_e}{4})
\end{aligned}$$

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

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

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

$$\langle W_{so}\rangle_Z = \alpha^2 m_lm_s\int_0^\infty \frac{|R_{00}|^2}{r}dr$$

$$= \quad 0 \text{ car } m_l = 0$$

Cas 2s : $n = 2$ et $l = 0$ donc $n_r = 1$

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

Cas 2p : $n = 2$ et $l = 1$ donc $n_r = 0$

$$\begin{aligned}
\langle W_{so}\rangle_Z &= \alpha^2 m_l m_s \int_0^\infty \frac{|R_{01}|^2}{r} dr \\
&= \frac{\alpha^2}{2} m_l m_s \int_0^\infty \frac{re^{-r}|{}_1F_1(0,4,r)|^2}{24} dr \\
&= \alpha^2 m_l m_s \int_0^\infty \frac{1}{24} re^{-r} dr \\
&= \alpha^2 m_l m_s \frac{1}{24} \Gamma(1) \\
&= \alpha^2 m_l m_s \frac{1}{24}\ 1 \\
&= \frac{\alpha^2}{24} m_l m_s
\end{aligned}$$

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, $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{so}$ 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, $nr = n_l - l - 1 = 0$ et

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

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 $s = 1/2$.

$$E^Z_{1s\pm} = -1 \pm \frac{g_eB}{2},$$

  - Cas 2s : $n = 2$, $l = 0$ et $s = 1/2$.

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

  - Cas 2p : $n = 2$, $l = 1$ et $s = 1/2$.

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

  * Energies finales dans le cas où W_Z est la perturbation (valable pour $B \to 0$) :

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

* Energies finales dans le cas où W_{so} est la perturbation (valable pour $B \to \infty$) :

- $E_{1s\pm} = -1 \pm \dfrac{g_e B}{2} \simeq -1 \pm B$
- $E_{2s\pm} = -\dfrac{1}{4} \pm \dfrac{g_e B}{2} \simeq -\dfrac{1}{4} \pm B$
- $E_{2p+\pm} = -\dfrac{1}{4} + B(1 \pm \dfrac{g_e}{2}) \pm \dfrac{\alpha^2}{48} \simeq -\dfrac{1}{4} + B(1 \pm 1) \pm \dfrac{\alpha^2}{48}$
- $E_{2p0\pm} = -\dfrac{1}{4} \pm \dfrac{g_e B}{2} \simeq -\dfrac{1}{4} \pm B$
- $E_{2p-\pm} = -\dfrac{1}{4} - B(1 \mp \dfrac{g_e}{2}) \mp \dfrac{\alpha^2}{48} \simeq -\dfrac{1}{4} - B(1 \mp 1) \mp \dfrac{\alpha^2}{48}$

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.