Questions de cours

- $\vec{\mu_\ell} = -\mu_B \dfrac{\vec{\ell}}{\hbar}$ μ_B défini > 0

$\mu_B = \dfrac{|q_e|\hbar}{2m_e}$

Energie d'interaction $W = -\vec{\mu_\ell}\cdot\vec{B}$

- densités de proba ρ

radiale → $\rho(r) = |R_{n\ell}|^2 r^2$ et $\rho(r)\,dr$ ⇒ proba élém

angulaire → $\rho(\theta,\varphi) = |Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi)|^2$ et $\rho(\theta,\varphi)\,d\Omega$ ⇒ (

Exo 2] a) différents termes de structure fine

W_{mv} ⇒ terme relativiste pour les orbites basses $n=1$

car $\frac{v_1}{c} \sim \alpha = \frac{1}{137}$

lim de prise en compte relativist.

W_{SO} ⇒ couplage spin-orbite

dû à $-\vec{\mu_s}\cdot\vec{B}$ avec $\vec{B} = -\frac{1}{c^2}\vec{v_e}\wedge\vec{E}$

mt magnétique de spin de l'e^-

créé par le noyau

W_D ⇒ Terme de Darwin : l'approx non relativiste conduit à une interaction non locale entre l'e^- et le chp coulombien du noyau

b) dvt limité ⇒ ordre 2

Terme $\Delta E_{mv}^{(1)}$

Le calcul de la perturbation avec les fonctions d'onde $\psi_{nljm_j}(r,\ \theta,\ \varphi)$ obtenues dans l'exercice 11.3 conduit à un calcul de perturbation d'états non dégénérés et la correction relativiste est donnée par les éléments matriciels diagonaux de W_V. L'énergie potentielle est donnée par $V = -e^2/r$, d'où l'énergie de perturbation :

$$E_V^{(1)} = -\frac{1}{2m_e c^2}\int \psi^*_{nljm_j}(E^2 + 2E\frac{e^2}{r} + \frac{e^4}{r^2})\,\psi_{nljm_j} r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr \quad (2)$$

Le calcul de ces intégrales fait intervenir les valeurs moyennes de $1/r$ et $1/r^2$ données par (7.3.47), à savoir :

$$\langle R^{-1}\rangle = \frac{1}{a_0 n^2} \quad ; \quad \langle R^{-2}\rangle = \frac{1}{a_0^2 n^3\,(l+\frac{1}{2})} \quad (3)$$

L'énergie de perturbation due à W_V est alors :

$$E_V^{(1)} = -\frac{|E_n|\alpha^2}{n}\left(\frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n}\right) \quad (4)$$

c)

Les fonctions $\psi_{nljm_j}(r,\ \theta,\ \varphi)$ sont donc des fonctions propres de W_{SO} et, par suite, le calcul de perturbation au premier ordre se ramène au calcul des éléments matriciels diagonaux de W_{SO} déterminés sur les états propres de H. Les énergies de perturbation sont données par :

$$E_{SO}^{(1)} = \langle \psi_{nljm_j}(r,\ \theta,\ \varphi)|W_{SO}|\psi_{nljm_j}(r,\ \theta,\ \varphi)\rangle \tag{5}$$

Les intégrales à calculer sont donc de la forme suivante, avec l'élément de volume donné par $dV = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$:

$$\frac{e^2}{4m_e^2c^2}\int \frac{R_{nl}^2(r)}{r}\,dr \iint Z_{ljm_j}^*(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)\,Z_{ljm_j}\ \sin\theta\ d\theta\ d\varphi \tag{6}$$

Puisque les fonctions Z_{ljm_j} sont des fonctions propres de $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{L}^2$ et $\mathbf{S}^2$, l'intégrale double en θ et φ vaut :

$$\hbar^2[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] = \hbar^2[j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \tag{7}$$

L'intégrale dépendant de r est la valeur moyenne de r^{-3} ; cette valeur est donnée par (7.3.47), pour $l \neq 0$, à savoir :

$$\langle R^{-3}\rangle = \frac{1}{a_0^3 n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \tag{8}$$

Posons $|E_n| = m_e e^4/2\hbar^2 n^2$; ce sont les valeurs absolues des niveaux d'énergie de l'hydrogène. La constante de strucure fine α s'écrit : $\alpha = e^2/\hbar c$. Les énergies de perturbation données par (5) s'écrivent, compte tenu de l'expression (4) de W_{SO} et des résultats (7) et (8), pour $l \neq 0$:

$$\text{pour } j = l + \frac{1}{2}\ :\ E_{SO}^{(1)+} = \frac{|E_n|\ \alpha^2}{2n}\frac{1}{(l+1)(l+\frac{1}{2})} \tag{9}$$

$$\text{pour } j = l - \frac{1}{2}\ :\ E_{SO}^{(1)-} = -\frac{|E_n|\ \alpha^2}{2n}\frac{1}{l\,(l+\frac{1}{2})} \tag{10}$$

Pour $l = 0$, on a $j = 1/2$ et l'expression (7) est égale à zéro ; l'énergie de perturbation est alors nulle.

d)

2. L'énergie totale de perturbation due à $W_{SO} + W_V$ s'obtient en additionnant les expressions (9) ou (10) de l'exercice 11.3 avec $E_V^{(1)}$. Si l'on remplace l par sa valeur en fonction de j, soit $l = j + 1/2$ ou $l = j - 1/2$, on obtient l'expression unique :

$$E_{n,j}^{(1)} = -\frac{|E_n|\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) \tag{5}$$

où j prend les valeurs $j = l \pm 1/2$. Le coefficient $|E_n|\alpha^2/n$ s'écrit encore $m_e c^2\alpha^4/2n^3$ en tenant compte de l'expression de $|E_n| = m_e c^2\alpha^2/2n^2$. On retrouve l'expression (11.3.7).

Exo3)

a) A-1) $H_0 = Ec + Ep = \frac{P^2}{2m} + V(r) = \frac{P^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$; H_0 agit donc que sur la partie radiale de la fonction d'onde associée au nombre quantique principal n. **(1 pt)**

Il agit également sur la partie angulaire au travers de l'opérateur P (en coordonnées sphérique) donc également sur l et ces projections ml.

(0.5 pt)

b) A-2) E_n=-13.6 Z²/n²=-13.6*Z²/3² ~ 1.5 Z² eV. **(0.5 pt)**

Si l'on considère le moment cinétique et le spin de l'électron, les nombres quantiques principaux sont nls et leurs projections ml, ms. |n,l,s,ml,ms>

(1 pt)

Ici pour la configuration $(3d)^1$:

n=3. l=2, s=1/2 donc -2<ml<2 et ms=1/2, -1/2. **(1 pt)**

La base des (2s+1)(2l+1)=10 vecteurs propres associés est donc :

|3 2 ½ -2 ½> , |3 2 ½ -1 ½>, |3 2 ½ 0 ½>, |3 2 ½ 1 ½>,|3 2 ½ 2 ½>

|3 2 ½ -2 -½> , |3 2 ½ -1 -½>, |3 2 ½ 0 -½>, |3 2 ½ 1 -½>,|3 2 ½ 2 -½> **(0.5 pt)**

B – Problème – 10.5 pts

c) B-1) $H=H_0+H_{so} = P^2/2m - Ze^2/r + \xi_n(r)\, L.S$

$\xi_n(r)$ n'agit que sur la partie radiale i.e n et pas S ni L. **(0.5 pt)**

d) B-2) J est la somme des moments cinétiques et de spin de l'électron.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}\,\vec{S}$$ **(1 pt)**

d'où : $H_{so} = (\xi_n(r)/2)\,(J^2 - L^2 - S^2)$ **(0.5 pt)**

e) B-3) En fait, il est possible d'utiliser la base mais elle ne sera pas appropriée car ces vecteurs ne sont pas vecteurs propres de l'Hamiltonien Spin-Orbite.

Pour décrire les états propres du système il est nécessaire d'introduire le nombre quantique J et ces projections mj. La nouvelle base est donc $|nlsjm_j\rangle$ eq. $|j\ mj\rangle$ car n,l et s sont fixés pour une configuration donnée. NB : ms et ml n'interviennent.

(0.5 pt)

f) B-4) s=1/2, l=2 donc |l-s|<j<l+s donc j=3/2,5/2 **(1 pt)**

Les projections de j sont comprissent entre -j<mj<j. **(0.5 pt)**

Les vecteurs propres sont donc :2

j=3/2 mj=-3/2,-1/2,1/2,3/2 :

|3/2, {-3/2,-1/2,1/2,3/2}> et dég=4=2j+1 **(0.5 pt)**

j=5/2 mj=-5/2,-3/2,-1/2,1/2,3/2,5/2 :

|5/2,{-5/2,-3/2,-1/2,1/2,3/2,5/2 }> (dég=6) **(0.5 pt)**

n   l, s

g) B-5) les éléments de matrice de H dans la base précédente s'écrivent : $|nls\,jm_j\rangle$

$\langle n'lsj'|H|nlsj\rangle = \langle n'|H_0|n\rangle\delta_{nn'} + \langle\xi_n(r)\rangle\,\delta_{nn'}\langle lsj'|H_{ls}|lsj\rangle$ **(0.5 pt)**

Ici pour la configuration $(3d)^1$, n=3, l=2, s=1/2 et j=3/2,5/2 d'où la matrice :

$$\left\langle 3 2\frac{1}{2}\, j' \middle| H \middle| 3 2 \frac{1}{2}\, j\right\rangle = 1.5Z^2 + \frac{\langle\xi_3(r)\rangle}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\left(j(j+1) - \frac{27}{4}\right)\hbar^2$$ mat diag.

Les éléments $j \neq j'$ sont nuls car {|lsj>} sont vecteurs propres de H_{so}. **(2 pts)**

AN : $E(j=3/2) = \langle 3\ 2\ ½\ 3/2\,|H|\,3\ 2\ ½\ 3/2\rangle = 1.5Z^2 - \langle\xi_3(r)\rangle * 3\hbar^2/2$ **(0.5 pt)**

$$\langle lsj'|H_{so}|lsj\rangle = \frac{\langle\xi_3(r)\rangle}{2}\hbar^2\Big(\underbrace{j(j+1)}_{\text{valeurs } j = 3/2} \underbrace{- l(l+1) - s(s+1)}_{-2(2+1) - \frac{1}{2}\times\frac{3}{2} = -6 - \frac{3}{4} = -\frac{27}{4}}\Big)$$

$\Rightarrow \langle H_{so}\rangle = \frac{15}{4} - \frac{27}{4} = -\frac{12}{4} = -\frac{3\hbar^2}{2}\langle\xi_3\rangle$

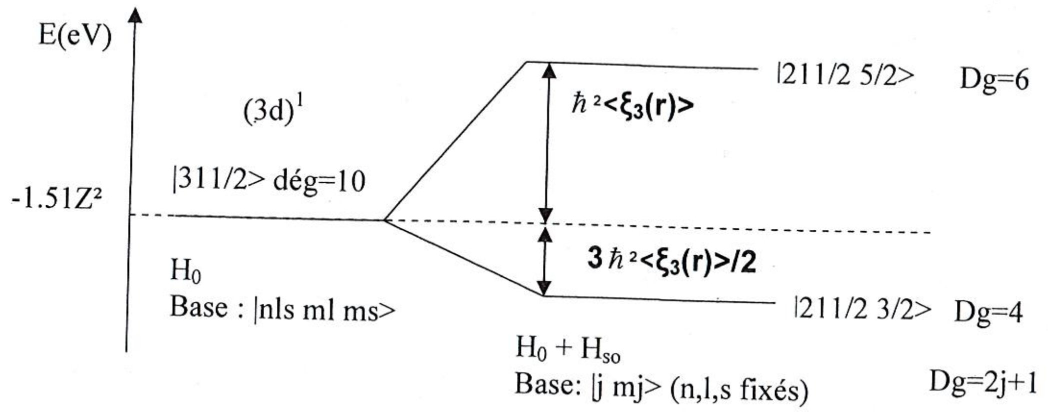
$\frac{3}{2}\times\frac{5}{2} = \frac{15}{4}$ $\frac{3}{2}\times\frac{5}{2} - \frac{27}{4} =$ $\frac{5}{2}\times\frac{7}{2}$

R)

$$E(j=5/2)=\langle 3\ 2\ \tfrac{1}{2}\ 5/2\ |H|\ 3\ 2\ \tfrac{1}{2}\ 5/2\rangle = 1.5Z^2 + \langle \xi_3(r)\rangle * \hbar^2$$ **(0.5 pt)**

$\frac{5}{2}\times\frac{7}{2}-\frac{27}{4}=2$

B-6)



Il y a donc levée partielle de dégénérescence. **(1.5 pts)**

------- Fin -------