B – Problème

Nous allons considérer dans ce problème l'interaction du spin nucléaire **I=1/2** d'un atome hydrogénoide (Z=53) avec le moment totale **J** = **L**+**S** de son électron de nombre quantique principal n=3. Le Hamiltonien d'interaction du système s'écrit :

$$\hat{H} = \widehat{H_0} + k\vec{I}.\vec{J} + \hat{A}$$

L'opérateur Â est un opérateur de couplage entre les états hyperfins du système. Il agit donc sur le moment total F=I+J du système et est défini par :

$$\hat{A}|F\rangle = \hbar^2(F-2)|F+1\rangle - (F-1)\hbar^2\,|F-1\rangle$$

B-1) Quelle(s) interaction(s) est prise en compte dans H_0 ? Dans $k\vec{I}.\vec{J}$?
Réponse : coulombienne uniquement
B-2) Donner, dans la base $|nLSJ\rangle$ la liste des vecteurs propres de H_0 associés à n=3. Combien d'états quantiques (mj) sont associés à chaque vecteur$|nLSJ\rangle$. Est-ce compatible avec le nombre d'électrons possible associé au remplissage complet de chaque couche L.
Reponses: n=3 l=0,1,2 S=1/2 J=L+S.
|3, 0, ½, ½> dg=2j+1=2 ($3s^2$)
|3, 1, ½, ½> dg=2j+1=2 ($3p^2$)
|3, 1, ½ 3/2> dg=4 ($3p^4$)
|3,2, ½ 3/2> dg=4 (3d4)
|3,2, ½ 5/2> dg=6 (3d6)
On a donc bien pour la 3s 2 états, pour la 3p 6 état et pour la 3d 10 états.

B-3) Donner l'expression et la valeur de l'énergie $E_0(n=3)$ associée à H_0 et fonction de Ry et en fonction de l'énergie de masse de l'électron.
Réponse : *$E(n=3) = (a^2mc^2/2)Z^2/n^2 = -13.6\ (53)^2/3^2 = 4.25$ keV*

Dans ce qui suis nous allons nous intéresser uniquement aux états de J=3/2.
B-4) En introduisant le nombre quantique F, donner la base des vecteurs $|\mathrm{IJF}\rangle$ associés à J=3/2. Sont-ils vecteurs propres de H_0, $\mathrm{k}\vec{\mathrm{I}}.\vec{\mathrm{J}}$ et H ? Justifier.
Réponse : I=1/2 J=3/2 => F=1 ou 2 soit les états |1/2, 3/2, 1> ou |1> et |1/2, 3/2, 2> ou |2>
Ils sont vecteur propres de deux premiers mais pas de H car pas de A ! on a pas A|F> = k|F> ! par contre ils sont vecteur propres de kI.J = $k/2(F^2-I^2-J^2)$ …

B-5) Donner l'expression de $k\vec{I}.\vec{J}$ en fonction de F^2 et calculer les valeurs propres de $\widehat{H_0} + k\vec{I}.\vec{J}$ en fonction de k pour les états propres: $|\mathrm{IJF}\rangle$. (on rappelle que pour les moments on a $F^2|F\rangle = \hbar^2 F(F+1)|F\rangle$)
Réponse : kI.J = $k/2(F^2-I^2+J^2)$ et <H0>=4.25keV

$$\left\langle \frac{1}{2},\frac{3}{2},1\middle|\widehat{H_0} + k\vec{I}.\vec{J}\middle|\frac{1}{2},\frac{3}{2},1\right\rangle = 4.25 10^3 + \frac{k\hbar^2}{2}\left(1(1+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right)$$
$$\left\langle \frac{1}{2},\frac{3}{2},2\middle|\widehat{H_0} + k\vec{I}.\vec{J}\middle|\frac{1}{2},\frac{3}{2},2\right\rangle = 4.25 10^3 + \frac{k\hbar^2}{2}\left(2(2+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right)$$

B-5) Calculer les 4 éléments de matrices associés à A dans la base des vecteurs $|\mathrm{IJF}\rangle$.
Réponse :

$$\langle F'|\hat{A}|F\rangle = \hbar^2(F-2)\langle F'|F+1\rangle + (F-1)\hbar^2\,\langle F'|F-1\rangle$$

Donc

$$\langle 1|\hat{A}|1\rangle = 0$$

$$\langle 2|\hat{A}|1\rangle = \hbar^2(1-2)\langle 2|2\rangle = -\hbar^2$$

$$\langle 2|\hat{A}|2\rangle = 0$$

$$\langle 1|\hat{A}|2\rangle = -\hbar^2$$

Soit la matrice : $\begin{pmatrix} 0 & -\hbar^2 \\ -\hbar^2 & 0 \end{pmatrix}$=<A>

B-6) Diagonaliser la matrice trouver la valeur propre et les vecteurs propres dans lesquels H est diagonal (ne pas oublier la normalisation).

Réponse : Valeur propres : $-\hbar^2$ et $\hbar^2$ les vecteurs propres sont donc

$$|V1 >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)\ pour - h^2$$

$$|V2 >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)\ pour\ h^2$$

B-7) Calculer dans cette nouvelle base les valeurs propres de H et faire un schéma de niveau faisant apparaitre <H0>,<H0+kL.S> et <H> ainsi que les vecteurs propres associés à chaque niveaux.