



PHS3104 - Mécanique quantique II

Devoir #4 Solutionnaire – Automne 2014

(à remettre le 17 novembre au début du cours)

4.1 Niveau fondamental d'éléments

Considérons les atomes suivants : Na, Si, Mn. On admet que le couplage LS et les règles de Hund s'appliquent. Pour chacun de ces atomes :

- Déterminer le niveau fondamental (configuration et terme spectroscopique $^{2S+1}L_J$).
- Déterminer le moment cinétique et magnétique total de l'état fondamental.
- Déterminer en combien de faisceaux se divise un faisceau de ces atomes lorsqu'il passe par un appareil de Stern et Gerlach.

Solution 4.1

- a) L'atome de Na possède 11 électrons. À l'état fondamental, sa configuration électronique est

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = [\text{Ne}]3s^1.$$

Son terme spectroscopique est établi à partir de la sous-couche non remplie. Un seul électron est dans la couche $3s$, le moment de spin total est, par la première règle de Hund, $S = 1/2$. Puisque le niveau de valence correspond à une orbitale s , le moment angulaire total est $L = 0$.

Étant donné que la couche est exactement à moitié remplie, nous avons que $J = S = 1/2$, de sorte que le terme spectroscopique de l'état fondamental de Na est

$$^2S_{1/2}.$$

La configuration électronique du Si (14 électrons) est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 = [\text{Ne}]3s^2 3p^2$, et le terme spectroscopique associé est 3P_0 .

La configuration électronique du Mn (25 électrons) est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 = [\text{Ar}]3d^5 4s^2$, et le terme spectroscopique associé est $^6S_{5/2}$.

- b) Le moment cinétique total d'un atome est déterminé à partir de

$$|\hat{\mathbf{J}}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}$$

et le moment magnétique par

$$|m| = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)},$$

avec μ_B le magnéton de Bohr et g_J le facteur de Landé.

Dans le cas de l'atome de Na, $|\mathbf{J}| = \frac{\sqrt{3}}{2}$ et $|m| = \sqrt{3}\mu_B$ avec $g_J = 2$.

Pour l'atome de Si, $J = 0$ et $|m| = 0$ alors que pour le Mn, $|J| = \frac{\sqrt{35}}{2}h$ et $|m| = \sqrt{35}\mu_B$ avec $g_J = 2$.

- c) La division d'un faisceau d'atomes dans l'expérience de Stern-Gerlach dépend de la dégénérescence ($2J + 1$ valeurs de M_J) du niveau fondamental.

Ainsi, dans le cas de l'atome de Na, $J = 1/2$ et par conséquent $M_J = \{1/2, -1/2\}$ de sorte que dans l'expérience de Stern-Gerlach, le faisceau incident se divise en deux composantes.

Pour l'atome de Si, $J = 0$, $M_J = 0$ et conséquemment, il n'y a pas de division du faisceau incident.

Quant à l'atome de Mn, $J = 5/2$, $M_J = \{5/2, 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, -5/2\}$. Dans ce cas, le faisceau incident se divise en six.

4.2 Effet Stark sur l'atome d'hydrogène

L'effet Stark est lié au déplacement des niveaux d'énergie d'un atome soumis à un champ électrique statique. On considère l'effet du champ sur le premier niveau excité de l'atome d'hydrogène, qui est quatre fois dégénéré (on néglige le spin dans ce problème). Les orbitales atomiques 2s et 2p de l'atome d'H (désignées par $|nlm\rangle$) forment donc une base du sous-espace dégénéré dont les vecteurs sont :

$$\{|1\rangle = |200\rangle, |2\rangle = |211\rangle, |3\rangle = |210\rangle, |4\rangle = |21-1\rangle\}.$$

Dans cette base, les éléments de matrice $\langle nlm|\hat{H}'|n'l'm'\rangle$ de la perturbation $\hat{H}' = |e|E_0 r \cos\theta$ sont tous nuls, sauf lorsque $m = m'$. Ainsi, les deux seuls éléments non nuls de la représentation matricielle (4x4) de la perturbation sont :

$$\langle 210|\hat{H}'|200\rangle = \langle 200|\hat{H}'|210\rangle^* = -3ea_0E_0 = -\Delta.$$

- Calculer les corrections sur les niveaux d'énergie à l'aide de la théorie des perturbations stationnaires (cas dégénéré).
- Déterminer l'état (perturbé) de plus faible énergie en termes des vecteurs de la base initiale.

Solution 4.2

- a) La matrice de perturbation correspond à

$$\hat{H}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

avec $\Delta = 3|e|a_0E_0$. La correction sur les niveaux d'énergie est obtenue à partir de la diagonalisation de la matrice de perturbation. Les énergies de correction sont donc

$$E^{(1)} = \{0, 0, \Delta, -\Delta\}.$$

- b) L'état perturbé de plus faible énergie sera donc celui ayant l'énergie de correction $E^{(1)} = -\Delta$ et satisfaisant l'équation aux valeurs propres

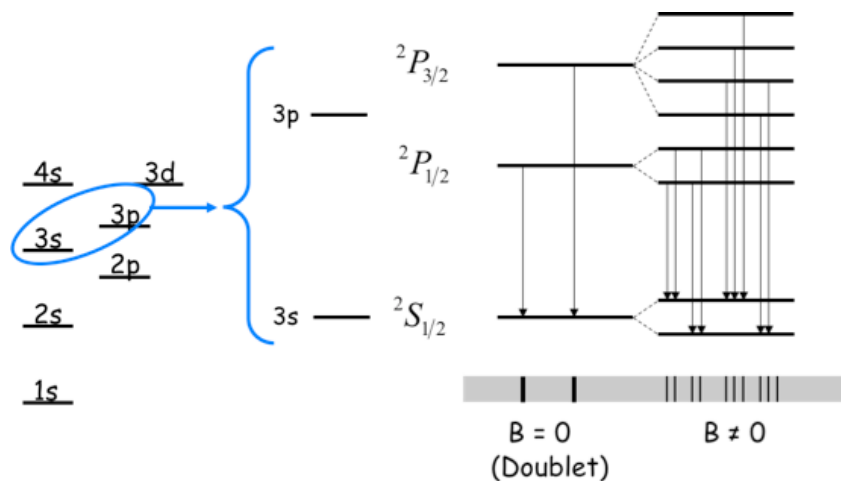
$$\hat{H}'|nlm\rangle = -\Delta|nlm\rangle.$$

L'état perturbé de plus faible énergie est

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle).$$

4.3 Structure fine et effet Zeeman anormal pour l'atome de sodium

La raie spectrale jaune émise par le sodium suite à la transition entre les sous-couches 3p et 3s est en fait un doublet dont les longueurs d'onde sont 589.592 nm et 588.995 nm. Suite à l'application d'un champ magnétique statique, le doublet se sépare en plusieurs raies, tel que représenté sur la figure ci-dessous. Les flèches représentent les transitions permises. Les niveaux illustrés ne sont évidemment pas à l'échelle.



On a vu en classe que le dédoublement de la sous-couche 3p est attribuable à l'interaction spin-orbite :

$$\hat{H}_{so} |JLSM_J\rangle = \xi [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] |JLSM_J\rangle.$$

- Déterminer les nombres quantiques J , L , S , associés aux trois niveaux impliqués dans l'émission du doublet.
- À l'aide de la méthode des perturbations stationnaires, établir la relation entre la séparation énergétique des raies du doublet et la constante ξ .
- Déduire la valeur de ξ (en eV) à l'aide du résultat dérivé en b).
- Suite au clivage des niveaux d'énergie en présence du champ (effet Zeeman) : déterminer la longueur d'onde des nouvelles raies pour un champ appliqué de 1 Tesla (vous devrez calculer les facteurs de Landé).
- Considérant qu'on est en présence de l'isotope ^{23}N du sodium (le seul qui est stable), déterminer l'effet du couplage hyperfin sur le nombre, la position et la dégénérescence des niveaux (sans champ appliqué) impliqués dans la transition du doublet. L'isotope est caractérisé par un spin nucléaire $I = 3/2$ et un facteur gyromagnétique $\gamma_N/2\pi = 11.3$ (MHz/T). On admet que

$$\hat{H}_{hf} |FIJM_F\rangle = \frac{1}{2} A [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] |FIJM_F\rangle.$$

et que A est suffisamment petit pour appliquer la théorie des perturbations.

Solution 4.3

- Les nombres quantiques des trois niveaux impliqués sont

$${}^2P_{3/2} \begin{cases} L = 1 \\ S = 1/2 \\ J = 3/2 \end{cases}$$

$${}^2P_{1/2} \begin{cases} L = 1 \\ S = 1/2 \\ J = 1/2 \end{cases}$$

$${}^2S_{1/2} \begin{cases} L = 0 \\ S = 1/2 \\ J = 1/2 \end{cases}$$

- Par la théorie des perturbations stationnaires, l'énergie de correction au premier ordre du couplage spin-orbite est

$$\begin{aligned}
 E_{so}^{(1)} &= \langle JLSM_J | \hat{H}_{so} | JLSM_J \rangle \\
 &= \xi (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)).
 \end{aligned}$$

En considérant la transition du doublet, la séparation énergétique des raies correspond à

$$\Delta E = hc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) = E_{so}^{(1)} |^2_{P_{3/2}} - E_{so}^{(1)} |^2_{P_{1/2}}$$

avec $\lambda_1 = 588.995$ nm et $\lambda_2 = 589.592$ nm. Avec

$$\begin{aligned}
 E_{so}^{(1)} |^2_{P_{3/2}} &= \xi \left\{ \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right\} = \xi \\
 E_{so}^{(1)} |^2_{P_{1/2}} &= \xi \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right\} = -2\xi
 \end{aligned}$$

la séparation en énergie entre les raies du doublet est

$$\Delta E = 3\xi.$$

c) En considérant la transition du doublet, la séparation énergétique des raies correspond à

$$\Delta E = hc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) = 3\xi.$$

Avec $\lambda_1 = 588.995$ nm et $\lambda_2 = 589.592$ nm, nous avons $\Delta E = 2.13$ meV et donc

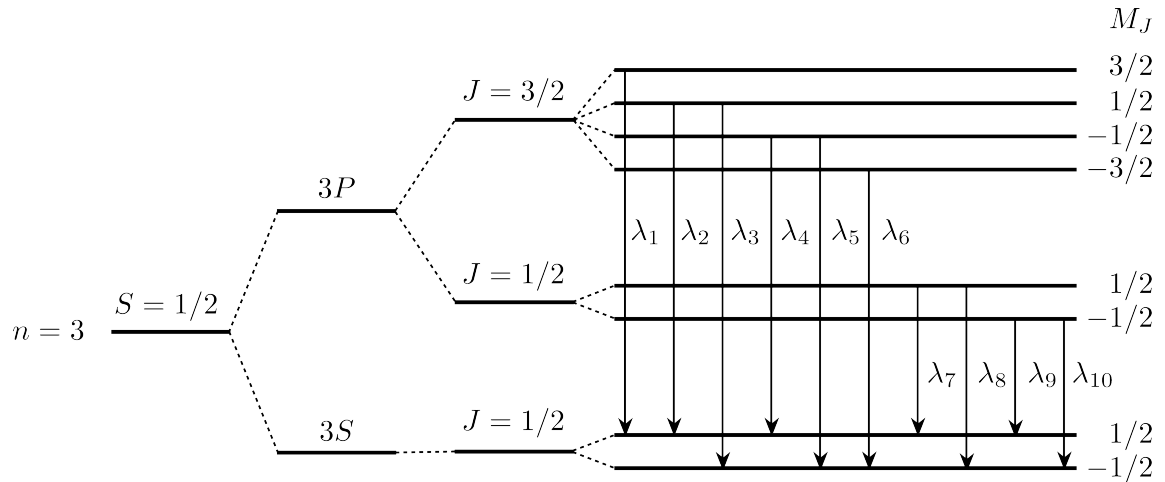
$$\xi = 0.71 \text{ meV}.$$

d) Le clivage par effet Zeeman correspond à la correction en énergie

$$E_{ze} = \mu_B g_J B_0 M_J$$

avec μ_B le magnéton de Bohr, g_J le facteur de Landé, B_0 le champ appliqué et M_J la projection du moment angulaire total.

Sous l'effet d'un champ magnétique, il y a une levée de dégénérescence des niveaux $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$ et $^2P_{3/2}$, telle qu'illustrée à la figure suivante.



Les raies de transition, dues à l'effet Zeeman, sont déterminées à partir de la relation

$$\lambda = \frac{hc}{E_{ze}}$$

avec h la constante de Planck et c la vitesse de la lumière. Ainsi, en considérant un champ appliqué de 1 T, les raies de transition sont

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 588.9788 \text{ nm} & \lambda_6 &= 589.0112 \text{ nm} \\ \lambda_2 &= 589.0004 \text{ nm} & \lambda_7 &= 589.6028 \text{ nm} \\ \lambda_3 &= 588.9680 \text{ nm} & \lambda_8 &= 589.5704 \text{ nm} \\ \lambda_4 &= 589.0220 \text{ nm} & \lambda_9 &= 589.6136 \text{ nm} \\ \lambda_5 &= 588.9896 \text{ nm} & \lambda_{10} &= 589.5812 \text{ nm} \end{aligned}$$

- e) Lorsque l'effet du couplage hyperfin est traité comme une faible perturbation, seules les orbitales S vont admettre le Hamiltonien de perturbation

$$\hat{H}_{hf} |FIJM_F\rangle = \frac{1}{2} A [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] |FIJM_F\rangle.$$

Ainsi, pour le niveau $^2S_{1/2}$ de l'atome de sodium, le couplage hyperfin se caractérise par la configuration électronique $L = 0$, $S = 1/2$, $J = 1/2$ et le moment de spin nucléaire $I = 3/2$. Le moment angulaire total (électronique + nucléaire) satisfait alors

$$\begin{aligned} F &= J + I \dots |J - I| \\ &= \{2, 1\}. \end{aligned}$$

Donc pour $F = 2$, la dégénérescence est $(2(2)+1) = 5$ et la correction de l'énergie, due au couplage hyperfin, est

$$E_{hf} = \frac{A}{2} \left\{ 2(2+1) - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right\} = \frac{3}{4} A.$$

Pour $F = 1$, la dégénérescence est $(2(1)+1) = 3$ et la correction de l'énergie

$$E_{hf} = -\frac{5}{4} A.$$

Le clivage hyperfin de l'atome de Na à l'état fondamental $^2S_{1/2}$ est illustré à la figure suivante.

