

### TD#4 : Structure atomique en présence d'un champ magnétique

Rq : Les questions marquées d'une \* (ex **2\***/) sont à faire en préparation de la séance de TD.

Les questions marquées de \*\* (ex **10\*\***/) seront à faire en DM.

En cours, nous avons montré que les structures des raies atomiques de l'hydrogène se caractérisent par des nombres quantiques  $n, l$  et  $m_l$  où  $n$  est le niveau d'énergie de l'état et  $l$  l'état de moment cinétique orbital  $\hat{L}$ . Un système atomique possédant un seul électron sur la couche externe peut se décrire de manière similaire à l'atome d'hydrogène en considérant l'ensemble (noyau+électrons internes) comme un "macro-proton" de moment cinétique total  $I$  dont la valeur prend en compte la structure interne de cet ensemble. Le système est alors décrit par les observables suivantes :

- $\hat{L}$  le moment cinétique orbital de l'électron
- $\hat{S}$  le moment cinétique de spin de l'électron
- $\hat{I}$  le moment cinétique total du noyau et des couches d'électrons internes

Un tel système est bien décrit par l'ECOC  $(\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z, \hat{I}^2, \hat{I}_z)$  et la base de vecteur propre s'écrit  $|n, L, m_l, S, m_s, I, m_I\rangle$ .

En présence d'un couplage entre les différents degrés de liberté de l'atome (e.g. le spin  $\hat{S}$  et l'orbite  $\hat{L}$  de l'électron), il est préférable d'utiliser un ECOC contenant le moment cinétique somme (e.g.  $\hat{J} = \hat{S} + \hat{L}$  dénommé le moment cinétique total de l'électron) dont la base de vecteur propre est vecteur propre du nouvel hamiltonien :  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine}$  où  $\hat{H}_{Fine} = A_F \hat{L} \cdot \hat{S}$  est l'hamiltonien de couplage spin-orbite. Ce couplage mène à la structure fine des atomes dont la base propre est  $|n, L, S, J, m_J, I, m_I\rangle$  d'énergie  $E_n + \frac{1}{2} A_F \hbar^2 (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$ .

**1\*/** Donnez l'ECOC adapté à l'état  $|n, L, S, J, m_J, I, m_I\rangle$ . Montrez que la 2<sup>eme</sup> observable commute avec la 4<sup>eme</sup>, que la 2<sup>eme</sup> commute avec la 5<sup>eme</sup> et que la 4<sup>eme</sup> commute avec la 6<sup>eme</sup>.

**2\*/** En remarquant que  $\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$ , expliquez pourquoi l'énergie de l'état propre  $|n, L, S, J, m_J, I, m_I\rangle$  prend la forme ci-dessus.

La description complète des niveaux d'énergie des atomes est obtenue lorsque l'on prend également en compte le couplage entre le moment cinétique total du noyau ( $\hat{I}$ ) et le moment cinétique total de l'électron ( $\hat{J}$ ) :  $\hat{H}_{Hyperfine} = A_{HF} \hat{J} \cdot \hat{I}$ . L'ECOC adapté à ce nouvel hamiltonien  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} + \hat{H}_{Hyperfine}$  est  $(\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{I}^2, \hat{F}^2, \hat{F}_z)$  où  $\hat{F}$  est le moment cinétique total de l'atome. La base correspondante est  $|n, L, S, J, I, F, m_F\rangle$ .

En présence d'un champ magnétique, chacun des moments magnétiques de l'atome ( $\hat{\mu}_L, \hat{\mu}_S, \hat{\mu}_I$ ) interagit avec le champ magnétique. L'énergie d'interaction est  $\hat{H}_B = -\hat{\mu}_k \cdot \mathbf{B}$ . Les observables de moments magnétiques sont proportionnelles aux observables correspondantes de moment

cinétique. Le coefficient de proportionnalité noté  $g_k$  est appelé facteur de Landé (Landé g-factor en anglais). On a donc  $\hat{\mu}_L = -g_L \frac{\mu_b}{\hbar} \hat{\mathbf{L}}$ , où  $\mu_b = \frac{\hbar e}{2m_e}$  est le magnéton de Bohr.

Le Hamiltonien du système complet s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} + \hat{H}_{Hyperfine} + \frac{\mu_b}{\hbar} (g_L \hat{\mathbf{L}} + g_S \hat{\mathbf{S}} + g_I \hat{\mathbf{I}}) \cdot \mathbf{B} \quad (1)$$

3\*/ On suppose que le champ  $\mathbf{B}$  est orienté suivant  $z$ . Que devient le Hamiltonien ci-dessus ?

## Boite à outils

### Méthode d'approximation par perturbation

Dans le cadre de ce TD, nous utiliserons les résultats suivants qui seront démontrés en cours. Soit  $\hat{H}_1$  un hamiltonien aux propriétés connues, c'est-à-dire dont on connaît tous les états propres  $|\Psi_n\rangle$  et énergies propres  $E_n$  et  $\hat{W}$  un hamiltonien de perturbation.

A l'ordre 1 pour un système faiblement perturbé (i.e.  $\langle \Psi_n | \hat{W} | \Psi_n \rangle \ll E_n$ ), les états propres du système perturbé  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{W}$  sont les états :

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = |\Psi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \Psi_k | \hat{W} | \Psi_n \rangle}{E_n - E_k} |\Psi_k\rangle \quad (2)$$

et leurs énergies propres varient de la quantité  $\Delta E_n^{(1)} = \langle \Psi_n | \hat{W} | \Psi_n \rangle$

### Relation d'opérateurs

Si  $\hat{\mathbf{K}}$  est un opérateur de moment cinétique d'état propre ( $|K, m_K\rangle$ ) et  $\hat{\mathbf{V}}$  un opérateur vectoriel tel que  $\hat{\mathbf{K}} \times \hat{\mathbf{V}} = i\hbar \hat{\mathbf{V}}$  alors on a :

$$\langle K, m_K | \hat{\mathbf{V}} | K, m_K \rangle = \frac{1}{\hbar^2 K(K+1)} \langle K, m_K | (\hat{\mathbf{V}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) \hat{\mathbf{K}} | K, m_K \rangle \quad (3)$$

Remarque : Cette relation est un cas particulier du Théorème de Wigner-Eckart.

## A. Perturbation en champ faible : Facteur de Landé $g_F$

Dans cette partie nous considérons une perturbation magnétique faible de telle sorte que l'énergie d'interaction  $\hat{H}_B$  puisse être considérée comme une perturbation du hamiltonien

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} + \hat{H}_{Hyperfine}$ , et nous nous restreignons au déplacement des états de moment cinétique orbital nul ( $L=0$ , états "s")

4/ Pour appliquer la méthode des perturbations ci-dessus, identifiez  $\hat{W}$  et  $\hat{H}_1$  dans le cas présent. Quelle est la base propre  $|\Psi_n\rangle$  et les énergies propres  $E_n$  de  $\hat{H}_1$ ? Pour quelle valeur de champ magnétique est-ce que la méthode perturbative sera correcte?

5/ Établissez l'expression formelle du déplacement énergétique des états propres au premier ordre (i.e. pour de faibles champs magnétiques). Justifiez que pour  $L=0$ , l'interaction spin-orbite ne contribue pas à l'énergie et que le Hamiltonien d'interaction s'écrit  $\hat{H}_B = \frac{\mu_b}{\hbar}(g_S\hat{S} + g_I\hat{I})\cdot\mathbf{B}$

On pose  $\hat{\mu}_J = -\frac{\mu_b}{\hbar}(g_S\hat{S}) = -\frac{\mu_b}{\hbar}(g_J\hat{J})$ ,  $\hat{\mu}_I = -\frac{\mu_b}{\hbar}g_I\hat{I}$  et  $\hat{\mu}_F = -\frac{\mu_b}{\hbar}(g_J\hat{J} + g_I\hat{I})$

6/ En utilisant l'équation 3 avec  $\hat{K} = \hat{F}$  et  $\hat{V} = \hat{J}$  ou  $\hat{I}$ , établissez l'expression de  $g_F$  en fonction de  $g_J = g_S, g_I, J = S, I$  et  $F$  où  $g_F$  est défini par :

$$\langle F, m_F | \hat{\mu}_F | F, m_F \rangle = -g_F \frac{\mu_b}{\hbar} \langle F, m_F | \hat{F} | F, m_F \rangle \quad (4)$$

7/ En déduire l'expression analytique du déplacement énergétique des états propres à l'ordre 1 de la perturbation. Ce mécanisme de déplacement en champ faible s'appelle l'effet Zeeman.

8/ Quels sont les états de moment cinétique total accessibles pour un atome de Rubidium de moment cinétique nucléaire  $I=3/2$ , de moment électronique orbital  $L=0$  et de spin électronique  $S=1/2$ ? En négligeant l'interaction Hyperfine, tracez l'évolution de l'énergie des états propres en fonction du champ magnétique dans l'approximation de champ faible.

9/ Comparez ce mécanisme au phénomène classique de précession de Larmor.

La constante de couplage Hyperfine de l'état  $5^2S_{1/2}$  vaut :

$$A_{5^2S_{1/2}} = h \quad 3.417341305452145(45) \text{ GHz.}$$

10\*\*/ A quoi correspond l'état  $5^2S_{1/2}$  en terme de nombres quantiques? Tracez l'évolution des énergies de tous les sous-états Zeeman de l'état  $5^2S_{1/2}$  à champ magnétique faible en prenant en compte toutes les interactions.

On rappelle  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} + \hat{H}_{Hyperfine} + \frac{\mu_b}{\hbar}(g_L\hat{L} + g_S\hat{S} + g_I\hat{I})\cdot\mathbf{B}$ .

## B. Perturbation en champ fort : Facteur de Landé $g_J$

On considère maintenant un champ magnétique fort tel que :

$$\langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} | J, m_J, I, m_I \rangle \gg \langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_B | J, m_J, I, m_I \rangle \quad (5)$$

$$\langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_B | J, m_J, I, m_I \rangle \gg \langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_{Hyperfine} | J, m_J, I, m_I \rangle \quad (6)$$

où  $\hat{H}_B = \hat{\mu}_F \cdot \mathbf{B}$

On souhaite calculer le déplacement énergétique des états propres.

**11\*\*** / Quelle base d'états est adaptée à l'étude de ce problème ?

**12\*\*** / Donnez l'expression formelle du déplacement énergétique

**13\*\*** / De manière analogue à la question **6** /, donnez une expression analytique de l'élément de matrice  $\langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_B | J, m_J, I, m_I \rangle$ . Définissez  $g_J$  et donnez-en une expression en fonction des paramètres du système.

**14\*\*** / On pose  $\hat{J}^+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$  et  $\hat{J}^- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$ . En remarquant que  $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{I}} = \hat{J}_z \hat{I}_z + 1/2(\hat{J}^+ \hat{I}^- + \hat{J}^- \hat{I}^+)$ , calculez  $\langle J, m_J, I, m_I | \hat{H}_{\text{Hyperfin}} | J, m_J, I, m_I \rangle$ .

**15\*\*** / Tracez toujours pour le Rubidium l'évolution de l'énergie des états propres de champ fort. On donne  $g_s = 2$  et  $g_I = -0.001$ .

**16\*\*** / Refaites les questions 10 et 15 ci-dessus pour le cas du Cesium ( $^{133}\text{Cs}$ ) dans son état fondamental  $6^2S_{1/2}$ . On donne,  $I_{\text{Cs}} = 7/2$ ,  $L_{\text{Cs}} = 0$ ,  $A_{6^2S_{1/2}} = h \cdot 2.2981579425 \text{ GHz}$