TD#3 : Structure atomique en présence d'un champ magnétique
CORRECTION

1/ La base des vecteurs propres est $|n, L, S, J, m_J, I, m_I\rangle$, on en déduit alors l'ECOC correspondant $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{I}^2, \hat{I}_z\}$. Vérifions que ces observables commutent entre elles :

- Comme le spin et les coordonnées correspondent à des degrés de liberté différents : $[\hat{S}, \hat{r}] = [\hat{S}, \hat{p}] = 0$ soit $[\hat{S}, \hat{L}] = 0$ et donc $[\hat{S}^2, \hat{L}^2] = 0$.
- Avec le résultat précédent on a donc $[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = 0$ et $[\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0$.
- Le hamiltonien $\hat{H}_0$ est invariant par rotation ainsi il commute avec tous les opérateurs rotations soit $[\hat{H}_0, \hat{L}^2] = 0$ (démonstration : Hamiltonien de la forme $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$ et $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ ainsi on montre que $[\hat{p}^2, \hat{L}^2] = 0$ et $[V(\hat{r}), \hat{L}^2] = 0$). De plus puisque $[\hat{S}, \hat{L}] = 0$ on a $[\hat{H}_{Fine}, \hat{L}^2] = 0$ soit encore $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$.
- D'après le point précédent on a aussi $[\hat{H}_0, \hat{S}^2] = 0$. De même $[\hat{H}_{Fine}, \hat{S}^2] = 0$ soit encore $[\hat{H}, \hat{S}^2] = 0$.
- Puisque $[\hat{H}, \hat{S}^2] = 0$, $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$ et $[\hat{H}, \hat{L} \cdot \hat{S}] = 0$ on a $[\hat{H}, \hat{J}^2] = 0$.
- On a $[\hat{L}_a, \hat{L}_b] = i\hbar \hat{L}_c$ où $a, b, c = x, y, z$ (démonstration avec $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ et $[\hat{u}, \hat{p}_v] = i\hbar \delta_{uv}$). On a de manière générale pour les moments cinétiques $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$, $[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x$ et $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$. Ainsi on montre facilement que $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$.

A. Perturbation en champ faible : Facteur de Landé g_F

4/ D'après la forme de $\hat{H}$ l'ECOC adapté est $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{I}^2, \hat{F}^2, \hat{F}_z\}$ et la base propre correspondante $|n, L, S, J, I, F, m_F\rangle$.

Pour pouvoir traiter ce problème avec la méthode perturbative il faut que $\langle \varphi_n | \hat{H}_0 + \hat{H}_{Fine} + \hat{H}_{Hyperfin} | \varphi_n \rangle \gg \langle \varphi_n | \hat{H}_{int} | \varphi_n \rangle$ soit encore $B \ll \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_n \rangle \hbar / \mu_b$

5/ Le déplacement énergétique est donné par $\Delta E_B = \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{H}_{int} | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle$.

L'interaction spin-orbite vaut $\hat{H}_{Fine} = A_F \hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} A_F [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$, ainsi pour $L = 0$ on a $\hat{J} = \hat{S}$ ainsi la valeur propre associée à cet opérateur est nulle, l'interaction spin-orbite ne contribue pas à l'énergie.

Concernant le Hamiltonien d'interaction, il s'écrit $\hat{H}_B = \frac{\mu_b B}{\hbar} (g_L \hat{L}_z + g_S \hat{S}_z + g_I \hat{I}_z)$ or la valeur propre possible de L_z vaut $\hbar m_L = 0$ car $L = 0$ ainsi il reste $\hat{H}_B = \frac{\mu_b B}{\hbar} (g_S \hat{S}_z + g_I \hat{I}_z) = \frac{\mu_b}{\hbar} (g_S \hat{S} + g_I \hat{I}) \cdot \vec{B}$.

6/ On pose $\hat{\mu}_F = \hat{\mu}_J + \hat{\mu}_I = -\frac{\mu_b}{\hbar} (g_J \hat{J} + g_I \hat{I})$. On a alors :

$$\langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{\mu}_F | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle = - \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \frac{\mu_b}{\hbar} (g_J \hat{J} + g_I \hat{I}) | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle$$

Or d'après le théorème de Wigner Eckart :

$$\begin{aligned} \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{J} | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{J} \cdot \hat{F}) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{J} \cdot (\hat{J} + \hat{I})) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{J}^2 + \hat{J} \cdot \hat{I}) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{J}^2 + \hat{F}^2 - \hat{I}^2) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{J(J+1) + F(F+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \left[\frac{1}{2} + \frac{J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \right] \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{I} | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{I} \cdot \hat{F}) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{I} \cdot (\hat{J} + \hat{I})) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{I}^2 + \hat{I} \cdot \hat{J}) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2\hbar^2 F(F+1)} \langle \dots | (\hat{I}^2 + \hat{F}^2 - \hat{J}^2) \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \frac{I(I+1) + F(F+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \\ &= \left[\frac{1}{2} + \frac{I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \right] \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \end{aligned}$$

soit au final

$$\begin{aligned} \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{\mu}_F | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle &= -\frac{\mu_b}{\hbar} (g_J \langle \dots | \hat{J} | \dots \rangle + g_I \langle \dots | \hat{I} | \dots \rangle) \\ &= -\frac{\mu_b}{\hbar} \left(\frac{g_J + g_I}{2} + g_J \frac{J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \right. \\ &\quad \left. + g_I \frac{I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \right) \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \\ &= -\frac{\mu_b}{\hbar} g_F \langle \dots | \hat{F} | \dots \rangle \end{aligned}$$

$$\text{où } g_F = \frac{g_J + g_I}{2} + g_J \frac{J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)}.$$

7/ Le déplacement énergétique à l'ordre 1 est donné par :

$$\begin{aligned} \Delta E_B^{(1)} &= \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{H}_{int} | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle \\ &= - \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{\mu}_F \cdot \vec{B} | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle \\ &= - \langle n, L, S, J, I, F, m_F | \hat{\mu}_{F,z} B | n, L, S, J, I, F, m_F \rangle \\ &= - \frac{\mu_b B}{\hbar} g_F \langle \dots | \hat{F}_z | \dots \rangle \\ &= \mu_b g_F m_F B \end{aligned}$$

8/ On a $\hat{F} = \hat{I} + \hat{J} = \hat{I} + \hat{S}$ car $L = 0$. Ainsi $|I - S| \leq F \leq I + S$ soit $F = 1, 2$ pour le ^{87}Rb . Ainsi pour l'état $F = 1 \rightarrow m_F = -1, 0, 1$ et pour $F = 2 \rightarrow m_F = -2, -1, 0, 1, 2$. Evolution des niveaux en fonction de B à tracer...