

# Tutorat 4 : Couplage spin-orbite et effet Zeeman d'un état $^2P$

Corrigé (2 juin 2021)

G. Lang

LPEM (ESPCI Paris, Univ. PSL, CNRS, Sorbonne Univ.)



Licence : Creative Commons Attribution - Partage dans les Mêmes Conditions 4.0 International

*En cas d'erreurs ou de coquilles : [guillaume.lang@espci.psl.eu](mailto:guillaume.lang@espci.psl.eu)*

# Plan

Système non-perturbé

Couplage spin-orbite

Effet Zeeman

Champ fort (effet Paschen-Back)

Champ faible

Champ quelconque

# 1 - Système non-perturbé

## ECOC, VALEURS PROPRES

Les états  $\Psi_{n,l,m}^{\pm}$  (ou  $|n, l, m_L, s, m_S\rangle$ ) sont les fonctions propres communes de l'ECOC :

$$\{ \mathbf{H}^{(0)}, \mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, \mathbf{S}_z \}$$

observable	$\mathbf{H}^{(0)}$	$\mathbf{L}^2$	$\mathbf{L}_z$	$\mathbf{S}^2$	$\mathbf{S}_z$
valeurs propres	$E_n^{(0)}$	$l(l+1)\hbar^2$	$m_L\hbar$	$s(s+1)\hbar^2$	$m_S\hbar$
nombre quantique	$n$ $\in \mathbb{N}^*$	$l$ $\in [0, n-1]$	$m_L$ $\in [-l, +l]$	$s$ $= 1/2$	$m_S$ $\in [-s, +s]$

# 1 - Système non-perturbé

## DÉGÉNÉRESCENCE DE L'ÉTAT $^2P$

nombre quantique	$n$	$l$	$m_L$	$s$	$m_S$
valeur	fixé	1	$[-1, +1]$	1/2	$[-1/2, +1/2]$

D'où une dégénérescence :  $\underbrace{3}_{m_L} \times \underbrace{2}_{m_S} = 6$

Les seuls nombres quantiques **libres** étant  $m_L$  et  $m_S$ , on parlera dans la suite de la **base**  $|m_L, m_S\rangle$ .

Explicitement :

$$|m_L, m_S\rangle = |n, 1, m_L, \frac{1}{2}, m_S\rangle = \underbrace{|n, 1\rangle}_{\text{radial}} \otimes \underbrace{|1, m_L, \frac{1}{2}, m_S\rangle}_{\text{angulaire}}$$

## 2 - Couplage spin-orbite

Objectif : déterminer la correction en énergie à l'ordre 1.

Situation de départ : le niveau  ${}^2P$  est dégénéré.

Approche « naïve » :

- ▶ déterminer  $\mathbf{H}^{(1)}$  restreint au sous-ev  ${}^2P$ , dans la base  $|m_L, m_S\rangle$ ,
- ▶ diagonaliser la matrice obtenue.

Or  $\mathbf{H}^{(1)}$  :

- ▶ ne commute pas avec  $\mathbf{L}_z$  donc n'est pas déjà diagonal ;
- ▶ a une écriture telle que le calcul des éléments de matrice paraît non-trivial.

On va donc en fait chercher :

- ▶ une autre base propre de  $\mathbf{H}^{(0)}$ , dans laquelle la perturbation est diagonale,
- ▶ une écriture de la perturbation telle que le calcul des éléments diagonaux soit aisé.

## 2 - Couplage spin-orbite

(recherche d'une autre base)

$$[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \vec{\mathbf{J}}] = \begin{bmatrix} [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, J_x] \\ [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, J_y] \\ [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, J_z] \end{bmatrix}$$

En utilisant :

$$[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A} [\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \mathbf{B}$$

on a :

$$[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, J_x] = [L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z, L_x + S_x] \quad (1)$$

$$\begin{aligned} &= L_x \underbrace{[S_x, L_x]}_0 + \underbrace{[L_x, L_x]}_0 S_x + L_y \underbrace{[S_y, L_x]}_0 + \underbrace{[L_y, L_x]}_{-i\hbar L_z} S_y \\ &\quad + L_z \underbrace{[S_z, L_x]}_0 + \underbrace{[L_z, L_x]}_{i\hbar L_y} S_z + L_x \underbrace{[S_x, S_x]}_0 + \underbrace{[L_x, S_x]}_0 S_x \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} &\quad + L_y \underbrace{[S_y, S_x]}_{-i\hbar S_z} + \underbrace{[L_y, S_x]}_0 S_y + L_z \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y} + \underbrace{[L_z, S_x]}_0 S_z \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

De même avec  $J_y$  et  $J_z$ , par équivalence des directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ .

## 2 - Couplage spin-orbite

(recherche d'une autre base)

$\Rightarrow \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  commute avec  $\vec{\mathbf{J}}$ , et trivialement avec  $\mathbf{J}^2$

**$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  est diagonal dans la base propre commune à  $\mathbf{J}^2$  et  $\mathbf{J}_z$ .**

On se place en fait dans l'ECOC :  $\{\mathbf{H}^{(0)}, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2, \mathbf{J}_z\}$

observable	$\mathbf{H}^{(0)}$	$\mathbf{L}^2$	$\mathbf{S}^2$	$\mathbf{J}^2$	$\mathbf{J}_z$
valeurs propres	$E_n^{(0)}$	$l(l+1)\hbar^2$	$s(s+1)\hbar^2$	$j(j+1)\hbar^2$	$m_J\hbar$
nombre quantique	$n \in \mathbb{N}^*$	$l \in [0, n-1]$	$s = 1/2$	$j \in [ l-s , l+s]$	$m_J \in [-j, j]$

$n$  fixé, état  ${}^2P \Rightarrow$  nombres quantiques libres :  $j, m_J \Rightarrow$  **base  $|j, m_J\rangle$**

Explicitement :

$$|j, m_J\rangle = |n, 1, \frac{1}{2}, j, m_J\rangle = \underbrace{|n, 1\rangle}_{\text{radial}} \otimes \underbrace{|1, \frac{1}{2}, j, m_J\rangle}_{\text{angulaire}}$$

## 2 - Couplage spin-orbite

(calcul à l'ordre 1 en énergie)

Dans cette base d'états non-perturbés ( $\mathbf{H}^{(0)} \in \text{ECOC}$ ),  $\mathbf{H}^{(1)}$  est diagonale, d'où directement les corrections en énergie :

$$\epsilon^{(1)} = \langle j, m_J | \mathbf{H}^{(1)} | j, m_J \rangle \quad (4)$$

$$= (\langle n, 1 | \otimes \langle 1, \frac{1}{2}, j, m_J |) f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} (|n, 1 \rangle \otimes |1, \frac{1}{2}, j, m_J \rangle) \quad (5)$$

$$= \langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle j, m_J | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | j, m_J \rangle \quad (6)$$

$$\text{On a : } \mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + \underbrace{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}_{2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})} \Leftrightarrow \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$$

Finalement :

$$\epsilon^{(1)} = \frac{a_{n,1}}{2} \langle j, m_J | (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) | j, m_J \rangle \quad (7)$$

$$= \frac{a_{n,1}}{2} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (8)$$

$$\epsilon_j^{(1)} = \frac{a_{n,1}}{2} \hbar^2 \left[ j(j+1) - \frac{11}{4} \right] \quad (9)$$

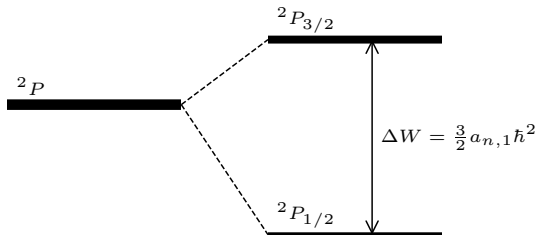


## 2 - Couplage spin-orbite

AU FINAL

$$\left. \begin{array}{l} l = 1 \\ s = \frac{1}{2} \end{array} \right\} \Rightarrow j \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\}$$

$j$	$\epsilon_j^{(1)}$	$m_j$	dégén.
$\frac{1}{2}$	$-a_{n,1}\hbar^2$	$\pm\frac{1}{2}$	2
$\frac{3}{2}$	$\frac{a_{n,1}\hbar^2}{2}$	$\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$	4



### 3 - Effet Zeeman

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} + \cancel{\mathbf{H}^{(1)}} + \mathbf{H}^{(2)} = \mathbf{H}^{(0)} + \underbrace{\omega_B}_{\frac{eB}{2m_e}} (\mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z)$$

#### CHOIX DE LA BASE

$\mathbf{H}^{(2)}$  ne fait intervenir que des opérateurs de l'ECOC  $\{\mathbf{H}^{(0)}, \mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, \mathbf{S}_z\}$  :

$\mathbf{H}^{(2)}$  est diagonale dans  $\{|m_L, m_S\rangle\}$ .

#### CALCUL À L'ORDRE 1 EN ÉNERGIE

$$\epsilon^{(1)} = \langle m_L, m_S | \mathbf{H}^{(2)} | m_L, m_S \rangle \quad (10)$$

$$= \omega_B (\langle n, 1 | \otimes \langle 1, m_L, \frac{1}{2}, m_S |) (\mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z) (|n, 1\rangle \otimes |1, m_L, \frac{1}{2}, m_S\rangle) \quad (11)$$

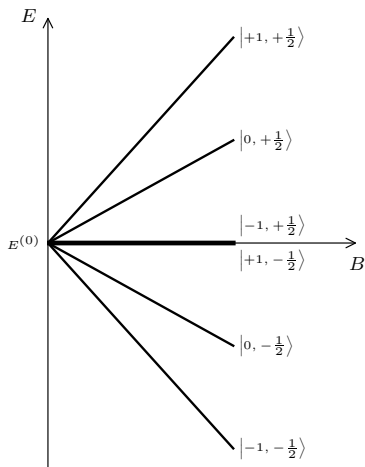
$$= \omega_B \langle n, 1 | n, 1 \rangle \langle m_L, m_S | (\mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z) | m_L, m_S \rangle \quad (12)$$

$$\epsilon_{m_L, m_S}^{(1)} = \omega_B \hbar (m_L + 2m_S) \quad (13)$$

### 3 - Effet Zeeman

**AU FINAL**

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon_{+1, +\frac{1}{2}}^{(1)} = 2\omega_B \hbar \\ \epsilon_{0, +\frac{1}{2}}^{(1)} = \omega_B \hbar \\ \epsilon_{-1, +\frac{1}{2}}^{(1)} = 0 \\ \epsilon_{+1, -\frac{1}{2}}^{(1)} = 0 \\ \epsilon_{0, -\frac{1}{2}}^{(1)} = -\omega_B \hbar \\ \epsilon_{-1, -\frac{1}{2}}^{(1)} = -2\omega_B \hbar \end{array} \right.$$



## 4 - Champ fort (effet Paschen-Back)

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} + \underbrace{\mathbf{H}^{(2)}}_{\ll \mathbf{H}^{(0)}} + \underbrace{\mathbf{H}^{(1)}}_{\ll \mathbf{H}^{(2)}} = \mathbf{H}^{(0)} + \omega_B(\mathbf{L}_z + 2\mathbf{S}_z) + f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

### CHOIX DE LA BASE

$$\begin{cases} \mathbf{H}^{(1)} \text{ seul : traité dans } \{|j, m_J\rangle\} & \text{(cf. partie 2)} \\ \mathbf{H}^{(2)} \text{ seul : traité dans } \{|m_L, m_S\rangle\} & \text{(cf. partie 3)} \end{cases}$$

La hiérarchie des perturbations contraint le choix :  $\{|m_L, m_S\rangle\}$

$\mathbf{H}^{(1)}$  perturbe les états issus de la perturbation  $\mathbf{H}^{(2)}$  (cf. partie 3) :

- ▶ 4 états non-dégénérés  $\{|1, \frac{1}{2}\rangle, |0, \frac{1}{2}\rangle, |0, -\frac{1}{2}\rangle, |-1, -\frac{1}{2}\rangle\}$ ,
- ▶ 2 états dégénérés  $\{|1, -\frac{1}{2}\rangle, |-1, \frac{1}{2}\rangle\}$ .

*(On ne repart pas du niveau  $^2P$  six fois dégénéré !)*

### RÉÉCRITURE DE $\mathbf{H}^{(1)}$

$$\text{En remarquant : } \begin{cases} \mathbf{L}_+ \mathbf{S}_- = \mathbf{L}_x \mathbf{S}_x + \mathbf{L}_y \mathbf{S}_y + i(\mathbf{L}_y \mathbf{S}_x - \mathbf{L}_x \mathbf{S}_y) \\ \mathbf{L}_- \mathbf{S}_+ = \mathbf{L}_x \mathbf{S}_x + \mathbf{L}_y \mathbf{S}_y - i(\mathbf{L}_y \mathbf{S}_x - \mathbf{L}_x \mathbf{S}_y) \end{cases}$$

on obtient :  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{L}_+ \mathbf{S}_- + \mathbf{L}_- \mathbf{S}_+) + \mathbf{L}_z \mathbf{S}_z$

On sait faire agir cette expression sur les états  $|m_L, m_S\rangle$ .

## 4 - Champ fort (effet Paschen-Back)

### CALCUL À L'ORDRE 1 EN ÉNERGIE

États non-dégénérés

$$\epsilon^{(1)} = \langle m_L, m_S | \mathbf{H}^{(1)} | m_L, m_S \rangle \quad (14)$$

$$= (\langle n, 1 | \otimes \langle 1, m_L, \frac{1}{2}, m_S |) f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} (|n, 1 \rangle \otimes |1, m_L, \frac{1}{2}, m_S \rangle) \quad (15)$$

$$= a_{n,1} \langle m_L, m_S | [\frac{1}{2}(\mathbf{L}_+ \mathbf{S}_- + \mathbf{L}_- \mathbf{S}_+) + \mathbf{L}_z \mathbf{S}_z] | m_L, m_S \rangle \quad (16)$$

$$\epsilon_{m_L, m_S}^{(1)} = a_{n,1} \hbar^2 m_L m_S \quad (17)$$

Soit :

$$\epsilon_{1, \frac{1}{2}}^{(1)} = \epsilon_{-1, -\frac{1}{2}}^{(1)} = \frac{a_{n,1} \hbar^2}{2} \quad \epsilon_{0, \frac{1}{2}}^{(1)} = \epsilon_{0, -\frac{1}{2}}^{(1)} = 0$$

## 4 - Champ fort (effet Paschen-Back)

### États dégénérés

On calcule la matrice  $H^{(1)}$  restreinte au sous-ev porté par  $|1, -\frac{1}{2}\rangle$  et  $|-1, \frac{1}{2}\rangle$ .

$$\mathbf{H}^{(1)} |1, -\frac{1}{2}\rangle = f(r) \left[ \underbrace{\frac{\mathbf{L}_+ \mathbf{S}_-}{2} |1, -\frac{1}{2}\rangle}_0 + \underbrace{\frac{\mathbf{L}_- \mathbf{S}_+}{2} |1, -\frac{1}{2}\rangle}_{\alpha |0, \frac{1}{2}\rangle} + \underbrace{\mathbf{L}_z \mathbf{S}_z |1, -\frac{1}{2}\rangle}_{-\frac{\hbar^2}{2} |1, -\frac{1}{2}\rangle} \right] \quad (18)$$

$$\mathbf{H}^{(1)} |-1, \frac{1}{2}\rangle = f(r) \left[ \underbrace{\frac{\mathbf{L}_+ \mathbf{S}_-}{2} |-1, \frac{1}{2}\rangle}_{\beta |0, -\frac{1}{2}\rangle} + \underbrace{\frac{\mathbf{L}_- \mathbf{S}_+}{2} |-1, \frac{1}{2}\rangle}_0 + \underbrace{\mathbf{L}_z \mathbf{S}_z |-1, \frac{1}{2}\rangle}_{-\frac{\hbar^2}{2} |-1, \frac{1}{2}\rangle} \right] \quad (19)$$

Alors :

$$\langle 1, -\frac{1}{2} | \mathbf{H}^{(1)} | 1, -\frac{1}{2} \rangle = \underbrace{\alpha \langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle 1, -\frac{1}{2} | 0, \frac{1}{2} \rangle}_0 - \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle 1, -\frac{1}{2} | 1, -\frac{1}{2} \rangle}_{a_{n,1}}$$

$$\langle -1, \frac{1}{2} | \mathbf{H}^{(1)} | 1, -\frac{1}{2} \rangle = \underbrace{\alpha \langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle -1, \frac{1}{2} | 0, \frac{1}{2} \rangle}_0 - \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle -1, \frac{1}{2} | 1, -\frac{1}{2} \rangle}_0$$

$$\langle -1, \frac{1}{2} | \mathbf{H}^{(1)} | -1, \frac{1}{2} \rangle = \underbrace{\beta \langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle -1, \frac{1}{2} | 0, -\frac{1}{2} \rangle}_0 - \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\langle n, 1 | f(r) | n, 1 \rangle \langle -1, \frac{1}{2} | -1, \frac{1}{2} \rangle}_{a_{n,1}}$$

## 4 - Champ fort (effet Paschen-Back)

D'où :

$$H_{\text{sous-ev}}^{(1)} = \begin{pmatrix} -a_{n,1} \frac{\hbar^2}{2} & 0 \\ 0 & -a_{n,1} \frac{\hbar^2}{2} \end{pmatrix}$$

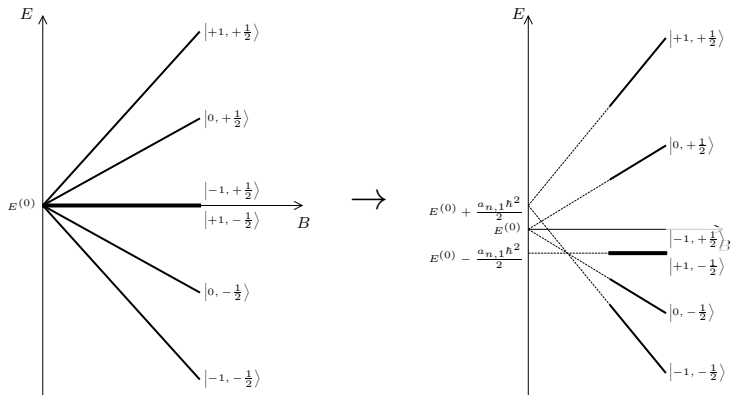
Soit immédiatement :

$$\epsilon_{1,-\frac{1}{2}}^{(1)} = \epsilon_{-1,\frac{1}{2}}^{(1)} = -a_{n,1} \frac{\hbar^2}{2}$$

## 4 - Champ fort (effet Paschen-Back)

**AU FINAL**

$$E = E_{(\text{partie 3})} + \epsilon_{m_L, m_S}^{(1)}$$





## 5 - Champ faible

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} + \underbrace{\mathbf{H}^{(1)}}_{\llcorner \mathbf{H}^{(0)} \llcorner} + \underbrace{\mathbf{H}^{(2)}}_{\llcorner \mathbf{H}^{(1)} \llcorner} = \mathbf{H}^{(0)} + f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \omega_B (\mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z)$$

### CHOIX DE LA BASE

La hiérarchie des perturbations contraint le choix :  $\{|j, m_J\rangle\}$

$\mathbf{H}^{(2)}$  perturbe les états issus de la perturbation  $\mathbf{H}^{(1)}$  (cf. partie 2) :

- ▶ les 2 états dégénérés  ${}^2P_{\frac{1}{2}}$  soit  $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$ ,
- ▶ les 4 états dégénérés  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$  soit  $\{|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle\}$ .

*(On ne repart pas du niveau  ${}^2P$  six fois dégénéré !)*

### RÉÉCRITURE DE $\mathbf{H}^{(2)}$

Non... On va utiliser les coefficients de Clebsch-Gordan pour décomposer les  $|j, m_J\rangle$  dans  $\{|m_L, m_S\rangle\}$ .

## 5 - Champ faible

### CALCUL À L'ORDRE 1 EN ÉNERGIE

États  $^2P_{\frac{1}{2}}$

On calcule  $H_{\frac{1}{2}}^{(2)}$ , la restriction de la matrice de  $\mathbf{H}^{(2)}$  au sous-ev  $^2P_{\frac{1}{2}}$ .

$$\left\langle \frac{1}{2}, m_J \left| \mathbf{H}^{(2)} \right| \frac{1}{2}, m'_J \right\rangle = \omega_B \left\langle \frac{1}{2}, m_J \left| \mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z \right| \frac{1}{2}, m'_J \right\rangle \quad (20)$$

$$= \omega_B \left[ \underbrace{\left\langle \frac{1}{2}, m_J \left| \mathbf{J}_z \right| \frac{1}{2}, m'_J \right\rangle}_{m_J \hbar \delta_{m_J, m'_J}} + \left\langle \frac{1}{2}, m_J \left| \mathbf{S}_z \right| \frac{1}{2}, m'_J \right\rangle \right] \quad (21)$$

Pour calculer le 2<sup>e</sup> terme, écrivons les  $|j, m_J\rangle$  dans  $\{|m_L, m_S\rangle\}$  :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right| &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle +1, -\frac{1}{2} \right| - \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle 0, +\frac{1}{2} \right| \\ \underbrace{\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right|}_{\langle j, m_J|} &= \sqrt{\frac{1}{3}} \underbrace{\left\langle 0, -\frac{1}{2} \right|}_{\langle m_L, m_S|} - \sqrt{\frac{2}{3}} \underbrace{\left\langle -1, +\frac{1}{2} \right|}_{\langle m_L, m_S|} \end{aligned}$$

## 5 - Champ faible

- ▶ Ces expressions font intervenir des états  $|m_L, m_S\rangle$  différents.
- ▶  $\mathbf{S}_z$  ne modifie pas ces états.

$\Rightarrow H_{\frac{1}{2}}^{(2)}$  est diagonale.

D'où directement les corrections en énergie :

$$\epsilon_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(1)} = \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \mathbf{H}^{(2)} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \quad (22)$$

$$= \omega_B \left[ \frac{\hbar}{2} + \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \right] \quad (23)$$

$$= \omega_B \left[ \frac{\hbar}{2} + \left( \sqrt{\frac{2}{3}} \langle \underbrace{+1, -\frac{1}{2}}_{|m_L, m_S|} | - \sqrt{\frac{1}{3}} \langle \underbrace{0, +\frac{1}{2}}_{|m_L, m_S|} | \right) \mathbf{S}_z \left( \sqrt{\frac{2}{3}} | \underbrace{+1, -\frac{1}{2}}_{|m_L, m_S|} \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} | \underbrace{0, +\frac{1}{2}}_{|m_L, m_S|} \rangle \right) \right] \quad (24)$$

$$= \omega_B \left[ \frac{\hbar}{2} - \frac{2}{3} \frac{\hbar}{2} + \frac{1}{3} \frac{\hbar}{2} \right] \quad (25)$$

$$\epsilon_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(1)} = \frac{1}{3} \omega_B \hbar \quad (26)$$

De même :  $\epsilon_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(1)} = -\frac{1}{3} \omega_B \hbar$

## 5 - Champ faible

États  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$

On calcule  $H_{\frac{3}{2}}^{(2)}$ , la restriction de la matrice de  $\mathbf{H}^{(2)}$  au sous-ev  ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ .

De façon analogue au cas  ${}^2P_{\frac{1}{2}}$  :

$$\left\langle \frac{3}{2}, m_J \left| \mathbf{H}^{(2)} \right| \frac{3}{2}, m'_J \right\rangle = \omega_B \left[ m_J \hbar \delta_{m_J, m'_J} + \left\langle \frac{3}{2}, m_J \left| \mathbf{S}_z \right| \frac{3}{2}, m'_J \right\rangle \right] \quad (27)$$

On écrit à nouveau les  $|j, m_J\rangle$  dans  $\{|m_L, m_S\rangle\}$  :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right| &= \left\langle +1, +\frac{1}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right| &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle +1, -\frac{1}{2} \right| + \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle 0, +\frac{1}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right| &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle 0, -\frac{1}{2} \right| + \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle -1, +\frac{1}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right| &= \left\langle -1, -\frac{1}{2} \right| \end{aligned}$$

$\underbrace{\left\langle \frac{3}{2}, m_J \right|}_{|j, m_J\rangle} \quad \underbrace{\left\langle m_L, m_S \right|}_{|m_L, m_S\rangle} \quad \underbrace{\left\langle m_L, m_S \right|}_{|m_L, m_S\rangle}$

## 5 - Champ faible

Avec le même raisonnement que précédemment :

$H_{\frac{3}{2}}^{(2)}$  est diagonale.

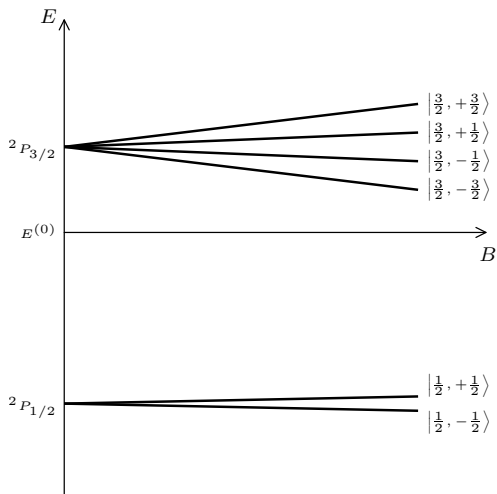
D'où directement les corrections en énergie :

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon_{\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}}^{(1)} = \omega_B \left[ \frac{3}{2}\hbar + \frac{\hbar}{2} \right] = 2\omega_B\hbar \\ \epsilon_{\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}}^{(1)} = \omega_B \left[ \frac{\hbar}{2} - \frac{1}{3}\frac{\hbar}{2} + \frac{2}{3}\frac{\hbar}{2} \right] = \frac{2}{3}\omega_B\hbar \\ \epsilon_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}}^{(1)} = \omega_B \left[ -\frac{\hbar}{2} - \frac{2}{3}\frac{\hbar}{2} + \frac{1}{3}\frac{\hbar}{2} \right] = -\frac{2}{3}\omega_B\hbar \\ \epsilon_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}^{(1)} = \omega_B \left[ -\frac{3}{2}\hbar - \frac{\hbar}{2} \right] = -2\omega_B\hbar \end{array} \right.$$

## 5 - Champ faible

**AU FINAL**

$$E = E_{(\text{partie 2})} + \epsilon_{j,m_j}^{(1)}$$



## 6 - Champ quelconque

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} + \underbrace{\mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)}}_{\ll \mathbf{H}^{(0)}} = \mathbf{H}^{(0)} + f(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \omega_B (\mathbf{L}_z + 2 \mathbf{S}_z)$$

### CHOIX DE LA BASE

La perturbation contient (cf. parties précédentes) :

- ▶  $\mathbf{J}^2$ ,  $\mathbf{L}^2$  et  $\mathbf{S}^2$  via  $\mathbf{H}^{(1)}$ ,
- ▶  $\mathbf{L}_z$  et  $\mathbf{S}_z$ , ou  $\mathbf{J}_z$  et  $\mathbf{S}_z$ , via  $\mathbf{H}^{(2)}$ .

Si bien que :

- ▶ base  $\{|m_L, m_S\rangle\}$  → lourde d'emploi,
- ▶ base  $\{|j, m_J\rangle\}$  → seul  $\mathbf{S}_z$  nécessite un calcul impliquant un changement de base.

On travaille dans  $\{|j, m_J\rangle\}$ .

## 6 - Champ quelconque

### CALCUL À L'ORDRE 1 EN ÉNERGIE

«  $\mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)}$  » perturbe les états  ${}^2P$  initiaux : 6 états dégénérés.

On calcule  $H^{(1+2)}$ , la restriction de la matrice de  $\mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)}$  au sous-ev  ${}^2P$ .

(pour la clarté de l'écriture «  $m_{J'}$  » dans l'expression suivante, on note  $|J, m_J\rangle$  plutôt que  $|j, m_j\rangle$ )

$$\langle J, m_J | H^{(1+2)} | J', m_{J'} \rangle = \langle J, m_J | f(r) \frac{J^2 - L^2 - S^2}{2} + \omega_B \mathbf{J}_z + \omega_B \mathbf{S}_z | J', m_{J'} \rangle \quad (28)$$

$$= \underbrace{\left[ a_{n,1} \hbar^2 \times \begin{cases} +\frac{1}{2} & (J = \frac{3}{2}) \\ -1 & (J = \frac{1}{2}) \end{cases} \right]}_{\text{cf. partie 2}} + \omega_B m_J \hbar \delta_{J,J'} \delta_{m_J, m_{J'}} \quad (29)$$
$$+ \omega_B \langle J, m_J | \mathbf{S}_z | J', m_{J'} \rangle$$



## 6 - Champ quelconque

Pour le calcul du dernier terme, on écrit les  $|J, m_J\rangle$  dans  $\{|m_L, m_S\rangle\}$ .

Dans la partie 5, les  $|J, m_J\rangle$  d'un même sous-ev  ${}^2P_J$  ( $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ ) faisaient intervenir des  $|m_L, m_S\rangle$  différents, d'où des matrices  $H_J^{(2)}$  diagonales.

Mais on considère ici  ${}^2P$  dans son ensemble...

Or :

- ▶  $|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$  et  $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$  font intervenir les mêmes états  $|+1, -\frac{1}{2}\rangle$  et  $|0, +\frac{1}{2}\rangle$  ;
- ▶  $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  et  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  font intervenir les mêmes états  $|-1, +\frac{1}{2}\rangle$  et  $|0, -\frac{1}{2}\rangle$ .

Les termes non-diagonaux correspondants de  $H^{(1+2)}$   
sont a priori non-nuls.

## 6 - Champ quelconque

Soit au final les termes  $\langle J, m_J | \mathbf{S}_z | J', m_{J'} \rangle$  non-nuls :

(cf. Eqs. 23–25 pour le calcul)

$$\langle \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \rangle = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{1}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = \frac{\hbar}{6}$$

$$\langle \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{\sqrt{2}}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) - \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = -\frac{\sqrt{2}}{3} \hbar$$

$$\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{2}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = -\frac{\hbar}{6}$$

$$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{2}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = -\frac{\hbar}{6}$$

$$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{\sqrt{2}}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) - \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = -\frac{\sqrt{2}}{3} \hbar$$

$$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \left[ \frac{1}{3} \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2}\right) \right] = \frac{\hbar}{6}$$

$$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} | \mathbf{S}_z | \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle = -\frac{\hbar}{2}$$

## 6 - Champ quelconque

On note  $\mathcal{B} = \{|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle\}$ .

En injectant les valeurs précédentes dans (29) :

$$\tilde{H}^{(1+2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} + 2k & & & & & \\ & \frac{1}{3} + \frac{2}{3}k & -\frac{\sqrt{2}}{3}k & & & 0 \\ & -\frac{\sqrt{2}}{3}k & -\frac{2}{3} + \frac{1}{3}k & & & \\ & & & \frac{1}{3} - \frac{2}{3}k & -\frac{\sqrt{2}}{3}k & \\ & & & -\frac{\sqrt{2}}{3}k & -\frac{2}{3} - \frac{1}{3}k & \\ & & & & & \frac{1}{3} - 2k \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}$$

avec :

$$\Delta W = \frac{3}{2} a_{n,1} \hbar^2$$

$$k = \frac{\hbar \omega_B}{\Delta W}$$

$$\tilde{H}^{(1+2)} = \frac{H^{(1+2)}}{\Delta W}$$

## 6 - Champ quelconque

$$\left| \tilde{H}^{(1+2)} - \beta I \right| = \left( \frac{1}{3} + 2k - \beta \right)$$

$$\times \left[ \left( \frac{1}{3} + \frac{2}{3}k - \beta \right) \left( -\frac{2}{3} + \frac{1}{3}k - \beta \right) - \frac{2}{9}k^2 \right]$$

$$\times \left[ \left( \frac{1}{3} - \frac{2}{3}k - \beta \right) \left( -\frac{2}{3} - \frac{1}{3}k - \beta \right) - \frac{2}{9}k^2 \right]$$

$$\times \left( \frac{1}{3} - 2k - \beta \right)$$

$$\left| \tilde{H}^{(1+2)} - \beta I \right| = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \beta = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta^2 + \beta \left( \frac{1}{3} - k \right) - \left( \frac{1}{3}k + \frac{2}{9} \right) = 0 \\ \beta^2 + \beta \left( \frac{1}{3} + k \right) + \left( \frac{1}{3}k - \frac{2}{9} \right) = 0 \end{cases}$$
$$\Leftrightarrow \begin{cases} \beta_{1,2} = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta_{3,4} = \frac{1}{2} \left[ k - \frac{1}{3} \pm \sqrt{k^2 + \frac{2}{3}k + 1} \right] \\ \beta_{5,6} = \frac{1}{2} \left[ -k - \frac{1}{3} \pm \sqrt{k^2 - \frac{2}{3}k + 1} \right] \end{cases}$$

## 6 - Champ quelconque

### LIMITE DE CHAMP FAIBLE

( $\rightarrow k$  petit)

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta_{1,2} = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta_{3,4} \approx \frac{1}{2} \left[ k - \frac{1}{3} \pm \left(1 + \frac{1}{3}k\right) \right] \\ \beta_{5,6} \approx \frac{1}{2} \left[ -k - \frac{1}{3} \pm \left(1 - \frac{1}{3}k\right) \right] \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \beta_{1,2} = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta_3 \approx \frac{1}{3} + \frac{2}{3}k \\ \beta_4 \approx -\frac{2}{3} + \frac{1}{3}k \\ \beta_5 \approx \frac{1}{3} - \frac{2}{3}k \\ \beta_6 \approx -\frac{2}{3} - \frac{1}{3}k \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{1,2} = \frac{a_{n,1}\hbar^2}{2} \pm 2\hbar\omega_B \\ \alpha_{3,5} \approx \frac{a_{n,1}\hbar^2}{2} \pm \frac{2}{3}\hbar\omega_B \\ \alpha_{4,6} \approx -a_{n,1}\hbar^2 \pm \frac{1}{3}\hbar\omega_B \end{array} \right.$$

OK avec partie 5

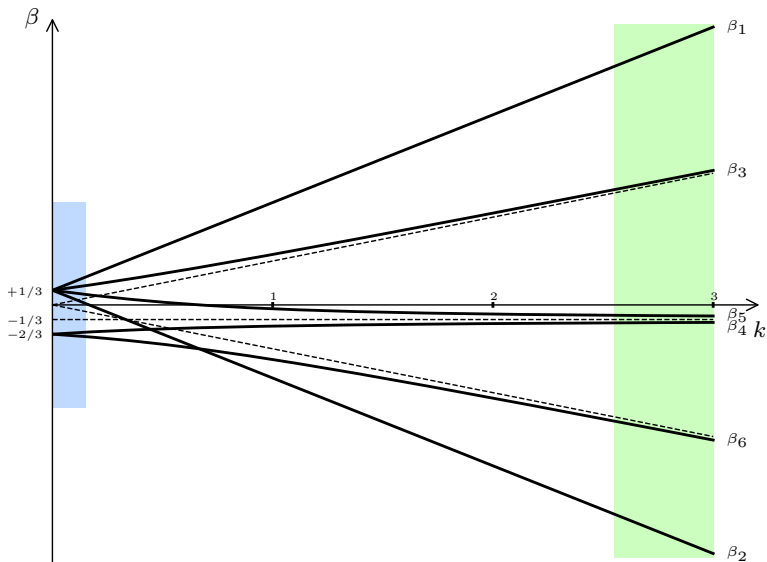
### LIMITE DE CHAMP FORT

( $\rightarrow k$  grand)

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta_{1,2} = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta_{3,4} \approx \frac{1}{2} \left[ k - \frac{1}{3} \pm k \left(1 + \frac{1}{3k}\right) \right] \\ \beta_{5,6} \approx \frac{1}{2} \left[ -k - \frac{1}{3} \pm k \left(1 - \frac{1}{3k}\right) \right] \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \beta_{1,2} = \frac{1}{3} \pm 2k \\ \beta_3 \approx +k \\ \beta_4 \approx -\frac{1}{3} \\ \beta_5 \approx -\frac{1}{3} \\ \beta_6 \approx -k \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{1,2} = \frac{a_{n,1}\hbar^2}{2} \pm 2\hbar\omega_B \\ \alpha_{3,6} \approx \pm \hbar\omega_B \\ \alpha_{4,5} \approx -\frac{a_{n,1}\hbar^2}{2} \end{array} \right.$$

OK avec partie 4

## 6 - Champ quelconque



(comparer les zones à champ faible/fort avec les figures obtenues en parties 5 et 4...)