



HAL
open science

Effet Zeeman d'atomes à plusieurs électrons : Etude de quelques structures de l'hélium et du néon excités par un jet d'atomes neutres

Claire C. Lhuillier

► **To cite this version:**

Claire C. Lhuillier. Effet Zeeman d'atomes à plusieurs électrons : Etude de quelques structures de l'hélium et du néon excités par un jet d'atomes neutres. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1976. Français. NNT: . tel-00010492

HAL Id: tel-00010492

<https://theses.hal.science/tel-00010492>

Submitted on 8 Oct 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LABORATOIRE DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE
SUPÉRIEURE



THESE DE DOCTORAT D'ETAT
ès Sciences Physiques
présentée
à l'Université Pierre et Marie Curie
- Paris VI -

par Claire LHUILLIER
pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences

Sujet de la thèse :

"Effet Zeeman d'atomes à plusieurs électrons : Etude de quelques structures de l'hélium et du néon excités par un jet d'atomes neutres".

Soutenue le AVRIL 1976

devant le Jury composé de :

MM. J. BROSSEL, Président
C. COHEN-TANNOUJDI
M. DUFAY
J.P. FAROUX
S. FENEUILLE
J.C. PEBAY-PEYROULA

)
Examineurs

THESE DE DOCTORAT D'ETAT

ès Sciences Physiques

présentée à

l'Université Pierre et Marie Curie
(Paris 6)

par Mme Claire LHUILLIER

pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences

Sujet de la thèse :

"Effet Zeeman d'atomes à plusieurs électrons :
Etude de quelques structures de l'Hélium et du Néon
excitées par un jet d'atomes neutres".

soutenue le 7 AVRIL 1976

devant le Jury composé de :

| | | |
|-----|---------------------|--------------|
| MM. | J. BROSEL | Président |
| | C. COHEN-TANNOUJJI |) Examineurs |
| | M. DUFAY | |
| | J.P. FAROUX | |
| | S. FENEUILLE | |
| | J.C. PEBAY-PEYROULA |) |



Le mémoire qui suit est le compte rendu d'un travail effectué au Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale Supérieure au cours des années 1970 - 1975. Je remercie vivement Monsieur le Professeur J. BROSEL pour l'accueil bienveillant et l'intérêt continu qu'il a porté à ces travaux.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à J.P. FAROUX qui a assumé la direction de ce travail et m'a apporté une aide constante. Je suis heureuse de dire que la réalisation de la partie expérimentale lui doit beaucoup et que sa collaboration a été très enrichissante en tous domaines.

Je remercie très vivement Monsieur le Professeur C. COHEN-TANNOUJJI qui, malgré ses nombreuses tâches, m'a fait bénéficier avec grande gentillesse de discussions très fructueuses.

Jacques DUPONT-ROC a accepté d'effectuer une lecture critique de ce manuscrit. Qu'il en soit tout particulièrement remercié.

Une expérience de "beam-gas spectroscopy" si légère soit-elle demande le concours d'un grand nombre de personnes : je remercie Pierre RIVIERE et Nicolas BILLY qui ont travaillé avec moi sur ce montage. Je ne saurais oublier tous ceux, chercheurs, ingénieurs et techniciens du Laboratoire qui nous ont aidé et ont rendu possible la réalisation de ce travail. La contribution de Madame A.M. BERLAND à la mise au point des divers dispositifs électroniques a été essentielle; j'ai beaucoup appris en travaillant avec elle et pour tout cela je la remercie. J'ai souvent fait appel à P. CASSOU et à J.C. GUILLAUME et je les remercie tout particulièrement pour la gentillesse, l'ingéniosité et la promptitude de leurs interventions.

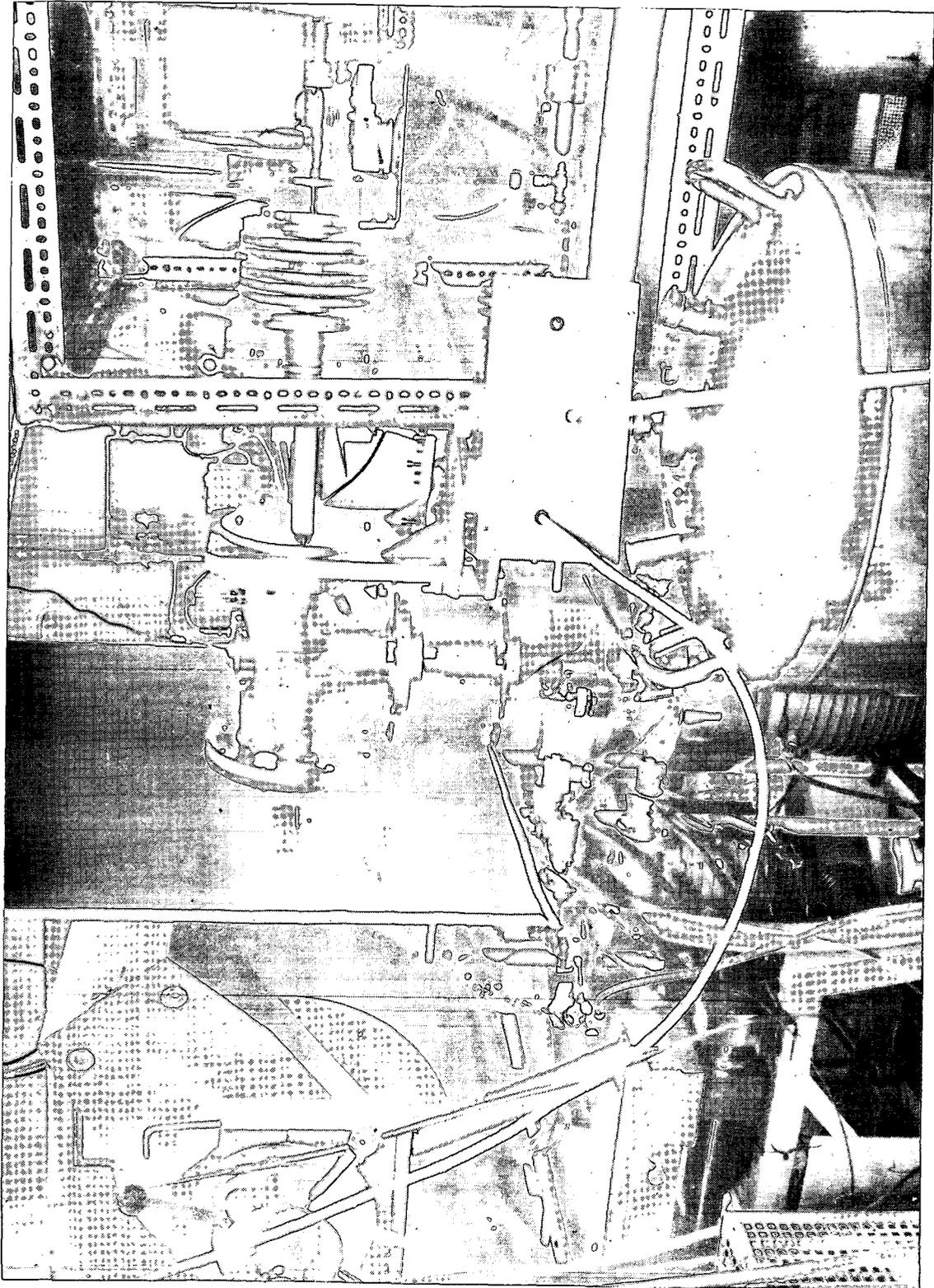
Je remercie Monsieur le Professeur P. JACQUINOT et Monsieur S. FENEUILLE pour les facilités qu'ils m'ont accordées lors de mon passage au Laboratoire Aimé Cotton. Monsieur S. FENEUILLE a montré de l'intérêt pour l'analyse des résultats expérimentaux obtenus sur le néon; qu'il en soit ici remercié. J'ai beaucoup apprécié de travailler sur ce sujet en collaboration avec E. LUC et je tiens tout particulièrement à l'en remercier.

Les responsables et techniciens du centre de calcul de l'Université Paris-Sud m'ont permis d'effectuer ces calculs dans les meilleures conditions matérielles; qu'ils trouvent ici l'expression de ma reconnaissance.

J'adresse enfin mes plus vifs remerciements à Mademoiselle I. BRODSCHI qui s'est chargée avec une grande gentillesse et beaucoup de compétence de la frappe du texte qui suit.

Madame AUDOIN a réalisé avec diligence le tirage de cette thèse. Je lui exprime ici toute ma gratitude.





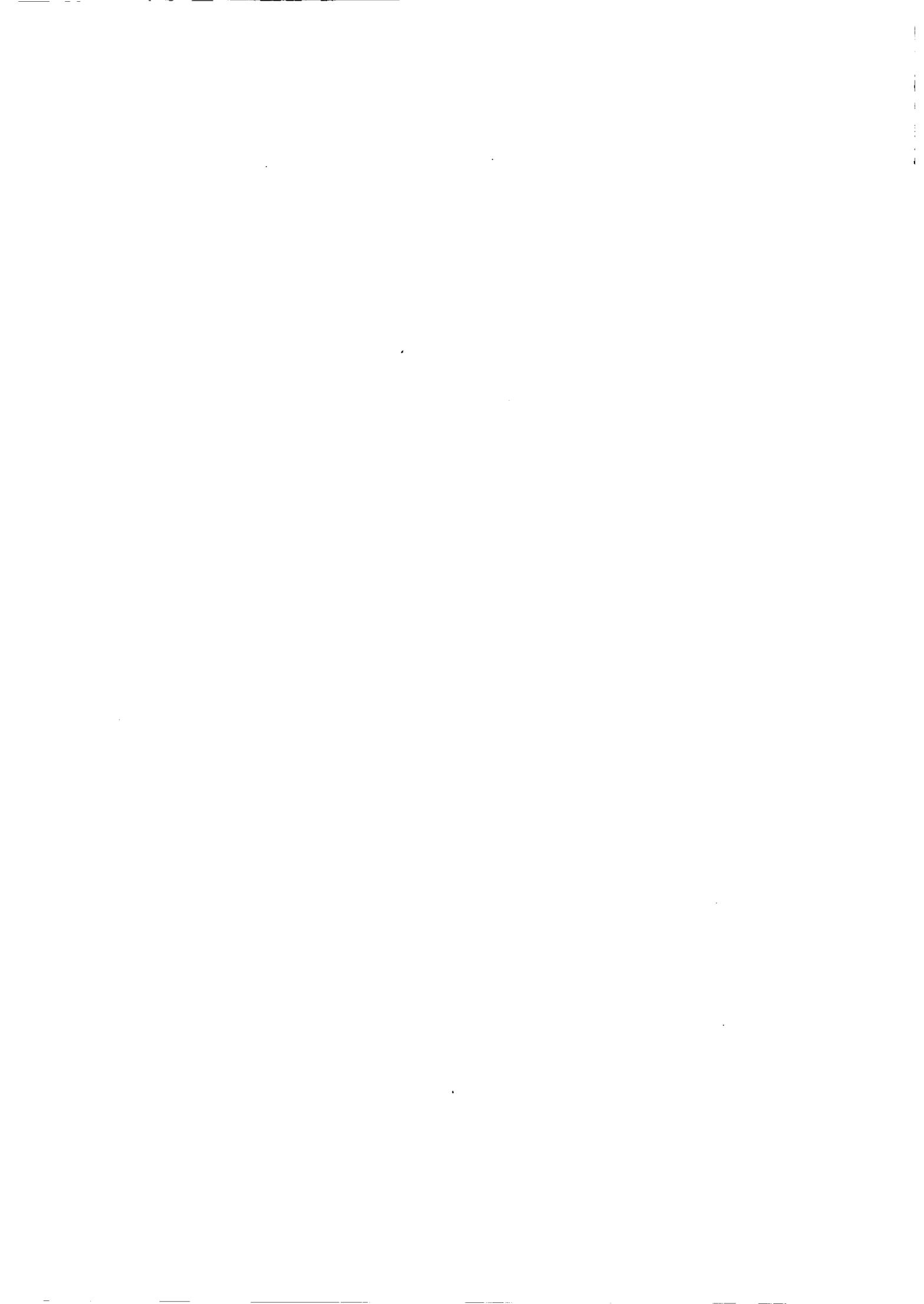


TABLE DES MATIERES

| | |
|---|----|
| <u>INTRODUCTION</u> | I |
| <u>PREMIERE PARTIE : HAMILTONIEN ZEEMAN D'UN ATOME A PLUSIEURS ELECTRONS. ASPECTS THEORIQUES</u> | 3 |
| <u>CHAPITRE I : Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons dans un champ magnétique externe indépendant du temps</u> | 5 |
| A. Equation de Breit et corrections relativistes | 6 |
| a) Equation de Breit généralisée | 6 |
| b) Corrections radiatives | 8 |
| B. La séparation des variables du centre de masse | 13 |
| a) "Quasi-séparabilité" du Hamiltonien de Breit | 14 |
| b) Transformation de jauge | 18 |
| C. Hamiltonien à la limite non relativiste | 20 |
| a) Le hamiltonien réduit exprimé en fonction des variables du laboratoire | 20 |
| b) Le hamiltonien réduit en fonction des variables internes | 23 |
| c) Le hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique statique | 25 |
| <u>CHAPITRE II : Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons dans un champ magnétique externe : point de vue classique</u> | 31 |
| A. Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons sans spin | 32 |
| a) Hamiltonien d'une particule sans spin dans un champ magnétique | 33 |
| b) Expression des potentiels et des champs retardés créés par une particule en mouvement | 34 |
| c) Hamiltonien d'une particule sans spin | 36 |
| B. Equations du mouvement du spin. Formulation hamiltonienne | 37 |
| a) Moments cinétiques et magnétiques intrinsèques | 37 |
| b) Equation du mouvement du spin dans un référentiel accéléré. Précession de Thomas | 38 |
| c) Formulation hamiltonienne de l'équation du mouvement du spin | 41 |
| (1) Equation du mouvement et Hamiltonien dans R(t) | 42 |
| (2) Equation du mouvement et Hamiltonien dans le Laboratoire | 43 |
| C. Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons dans un champ magnétique externe | 46 |
| a) Calcul du hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{mag}}^i$ | 46 |
| b) Calcul du hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{th}}^i$ | 47 |
| c) Hamiltonien total | 48 |
| <u>DEUXIEME PARTIE : EFFET ZEEMAN DE L'HELIUM</u> | 51 |
| <u>CHAPITRE III : Effet Zeeman des niveaux 3P de l'hélium</u> | 53 |
| A. Structure fine des niveaux 3P de l'hélium. Symétrie des fonctions d'onde | 54 |
| B. Découplage du hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique | 56 |
| C. Analyse tensorielle et forme phénoménologique du hamiltonien Zeeman des niveaux 3P | 64 |

| | |
|---|---------|
| a) Forme tensorielle du hamiltonien d'interaction dans une base $ L S J \rangle$ | 64 |
| b) Le diagramme Zeeman des niveaux $3P$ | 66 |
| D. Facteurs de Landé et effet diamagnétique des niveaux $3P$: Résultats numériques ($n = 2, 3, 4$) | 69 |
| a) Calcul des facteurs $g'_S, g'_L, g'_X, \tilde{S}^0, \tilde{S}^2$ des niveaux n^3P dans le cadre d'une approximation hydrogénoïde | 70 |
| b) Comparaison avec les résultats obtenus dans le cadre d'une approximation tenant compte des interactions de configuration | 72 |
| c) Comparaison des intégrales radiales de l'effet diamagnétique avec divers résultats expérimentaux | 76 |
| d) Ordre de grandeur des termes négligés | 76 |
| <u>CHAPITRE IV : Effet Zeeman des niveaux $3P$ de l'hélium : résultats expérimentaux</u> | 79 |
| A. Principe de l'expérience et problèmes spécifiques liés à la mesure du champ magnétique | 83 |
| a) Principe de l'expérience et schéma d'ensemble | 83 |
| b) Le champ magnétique - c) Gaussmètre à R.M.N. | 86 |
| d) Acquisition des données | 89 |
| B. Erreurs systématiques. Discussion de quelques origines éventuelles | 94 |
| a) Mesure du champ | 94 |
| b) Influence du champ motionnel | 98 |
| c) Examen de diverses causes d'erreurs systématiques | 99 |
| C. Résultats expérimentaux | 101 |
| a) Les croisements mesurés | 101 |
| b) Structures fines ou facteurs de Landé | 103 |
| <u>TROISIEME PARTIE : MONTAGE EXPERIMENTAL</u> | 107 |
| <u>CHAPITRE V : Montage expérimental</u> | 109 |
| A. Schéma d'ensemble du montage | 113 |
| B. Le jet atomique | 115 |
| a) La source | 115 |
| b) L'échange de charge | 120 |
| c) Détection du jet atomique | 124 |
| C. Le champ magnétique | 126 |
| a) Homogénéisation, régulation et balayage | 126 |
| b) La mesure du champ magnétique | 127 |
| 1°) Gaussmètre à oscillateur local AEG | 127 |
| 2°) Gaussmètre à oscillateur local Anderson | 130 |
| D. Signaux observés | 132 |
| <u>QUATRIEME PARTIE : EFFET ZEEMAN DU NEON</u> | 135 |
| <u>CHAPITRE VI : Effet Zeeman de la configuration $2p^54d$ du néon</u> | 137 |
| A. La configuration $2p^54d$ du néon : rappels théoriques et expérimentaux | 138 |
| a) L'ordre de grandeur des interactions et la nature du couplage | 140 |
| 1°) L'interaction électrostatique | 140 |
| 2°) Interaction spin-orbite | 143 |

| | |
|--|-----|
| b) Résultats de la méthode paramétrique. Comparaison aux résultats expérimentaux | 145 |
| c) Effet Paschen-Back des niveaux $d_4d'_4$, $d''_1d'_1$. Prédiction de la position des croisements de niveaux observables | 147 |
| 1°) Approximation phénoménologique d'un système à deux niveaux | 147 |
| 2°) Amélioration des fonctions d'onde | 147 |
| B. Les résultats expérimentaux | 149 |
| a) Effet Hanle | 151 |
| b) Les croisements de niveaux | 151 |
| 1°) Doublet d'_4d_4 | 151 |
| 2°) Doublet $d'_1d''_1$ | 153 |
| c) Conclusion | 155 |
| C. Analyse phénoménologique des résultats expérimentaux | 163 |
| a) Approximation à deux niveaux | 163 |
| b) Approximation à 4 niveaux | 167 |
| D. Etude a priori de l'effet Zeeman de la configuration $2p^54d$ | 169 |

| | |
|--|-----|
| <u>CONCLUSION</u> | 175 |
| <u>APPENDICE I</u> : Transformation de Lorentz | 179 |
| <u>APPENDICE II</u> : Potentiels et champs retardés créés par des moments magnétiques en mouvement | 181 |
| <u>APPENDICE III</u> : Méthodes graphiques appliquées à l'algèbre des moments angulaires | 185 |
| <u>APPENDICE IV</u> : Interaction électrostatique (configuration $2p^54d + 2p^55s$) | 189 |
| <u>APPENDICE V</u> : Interactions spin-orbite (configuration $2p^54d + 2p^55s$) | 193 |
| <u>APPENDICE VI</u> : Effet Zeeman et interaction diamagnétique | 195 |
| <u>REFERENCES</u> | 205 |



Les méthodes d'étude des états excités des atomes présentent une grande diversité. Très grossièrement, on peut les classer en deux grandes catégories selon que le mode d'excitation choisi est optique ou collisionnel. L'excitation optique est une méthode d'une très grande flexibilité, mais elle ne permet pas d'atteindre directement la totalité des niveaux excités (règles de sélection, sources accordables sur une gamme limitée de fréquences). L'excitation collisionnelle qui est souvent plus délicate présente par contre deux avantages importants : quasi absence de règles de sélection et très large spectre.

Dès 1928, SKINNER et APPELYARD (1) montrent que le bombardement électronique crée une anisotropie dans les états excités des atomes, anisotropie qui se manifeste par l'émission de lumière polarisée. En 1959, PEBAY-PEYROULA (2), alliant cette technique d'excitation par bombardement électronique aux méthodes de la spectroscopie hertzienne, effectue des mesures de facteurs de Landé et de durées de vie sur le mercure tandis que WIEDER et LAMB (3) réalisent, par résonance magnétique, les premières mesures de structures fines de l'hélium. A la même époque, FRANKEN (4) met en oeuvre la première mesure de résonance de croisements de niveaux. Parmi les travaux utilisant cette nouvelle technique, il faut citer plus particulièrement l'étude extensive des structures fines des deux isotopes de l'hélium (^4He et ^3He) réalisée par DESCOUBES (5). L'un des problèmes expérimentaux les plus cruciaux rencontrés par DESCOUBES est lié à la perturbation des trajectoires électroniques par le champ magnétique. Cet effet limite, de façon très critique, l'utilisation d'une telle méthode à la mesure des structures fines de l'ordre de 500 MHz au plus, ce qui interdit en particulier la mesure des grandes structures fines des niveaux ^3P de l'hélium.

(1) H.W.B. SKINNER et E.T.S. APPELYARD - Proc. Roy. Soc. 1928, A117, 224

(2) J.C. PEBAY-PEYROULA - J. Phys. Rad. 1959, 20, 629

(3) I. WIEDER et W.E. LAMB Jr. - Phys. Rev. 1957, 107, 125

(4) F.D. COLEGROVE, P.A. FRANKEN, R.R. LEWIS, R.H. SANDS - Phys. Rev. Letters, 1959, 3, 420

(5) J.P. DESCOUBES - Thèse, Université de Paris, 1967

L'extension évidente d'une telle technique consiste à utiliser non pas des électrons excitateurs mais des ions ou mieux encore des atomes neutres. Nous savons en effet depuis les travaux de VAN ECK que l'excitation par un jet d'ions ou d'atomes rapides permet d'aligner une vapeur atomique. L'excitation par un jet d'ions a déjà été utilisée pour réaliser par effet Hanle soit des mesures de durée de vie des niveaux excités, soit des études sur divers aspects du processus de collision; les travaux les plus importants dans ce domaine ont été réalisés à Lyon (6) et à Giessen (7). Il revient à KAUL (8) en 1967 d'avoir utilisé cette nouvelle source spectroscopique pour réaliser la première mesure de croisements de niveaux en champ non nul sur l'hélium excité par un jet d'ions H_2^+ . Dans ces conditions, il réussit à mesurer les grands intervalles de structure fine des niveaux n^3P ($n = 3$ à 6). Toutefois, son montage ne lui permit pas de mesurer la structure fine du niveau 2^3P (à cause de la courbure du jet excitateur qui atteint déjà 25° à 2300 G).

L'ensemble de ces résultats paraissaient suffisamment prometteurs et le champ ouvert suffisamment large pour que nous entreprenions donc en 1970 la construction d'un petit accélérateur en vue d'effectuer, en fort champ magnétique, des mesures de croisements de niveaux d'atomes excités par un jet de particules neutres.

Le choix des éléments par lesquels nous pouvions commencer notre investigation était largement ouvert. Nous avons décidé de commencer par l'hélium essentiellement pour deux raisons : d'une part en faire un test des possibilités du montage, d'autre part essayer éventuellement d'améliorer la précision des déterminations antérieures.

En effet, durant cette même période, la théorie des atomes à plusieurs électrons avait progressé considérablement et en 1970, lorsque nous avons entrepris ce travail, il semblait certain que l'avenir était très proche où la structure fine des niveaux 3P de l'hélium et plus particulièrement celle du 2^3P serait connue théoriquement avec une précision de l'ordre de 10^{-6} . A cette époque est publiée une détermination expérimentale de cette structure qui

(6) La situation de "beam-gas spectroscopy" a été étudiée plus particulièrement par H. CARRÉ - Thèse, Lyon, 1975

(7) W. DRTIL - Z. Naturforsch. 1969, 24A, 350
K. BUCHHAUPT - Z. Naturforsch. 1969, 24A, 1058

(8) R.D. KAUL - J. Opt. Soc. Am. 1967, 57, 1156

atteint le ppm. Cette mesure a été réalisée à Yale par LEWIS, PICHANICK et al. (9) par résonance magnétique sur un jet. Il nous sembla alors intéressant d'essayer de réaliser sur cette même structure une mesure de croisements de niveaux atteignant la même précision. La position des croisements de niveaux n'étant pas exactement sensible aux mêmes paramètres que les mesures de résonance magnétique, la confrontation des résultats devait donc permettre d'affiner notre connaissance expérimentale du niveau 2^3P .

La réalisation d'une telle expérience de précision nécessite une situation expérimentale assez simple et dont tous les paramètres soient aisément mesurables. A priori, la technique envisagée remplit ces conditions : le jet d'atomes neutres excitateur peut être très bien collimaté et définit une direction d'excitation très bien déterminée; par ailleurs, la réalisation d'un champ magnétique d'intensité moyenne, homogène à 10^{-6} près sur la région d'excitation de la cible est également un problème qui ne présente pas d'impossibilité de principe. Cette première expérience de précision sur un système simple n'était pas la seule réalisable; il est évident que nous aurions pu sans difficulté reprendre la même étude sur 3He (toutefois, l'état de la théorie, fort peu avancé sur ce sujet, ne semblait pas justifier une expérience de précision). Parallèlement au travail présenté ici, nous avons également réalisé des mesures de croisements et d'anticroisements de niveaux dans des systèmes hydrogénoïdes et, en particulier, $^4He^+$. Ce travail sera exposé dans la thèse de troisième cycle de N. BILLY.

Par ailleurs, il nous a paru intéressant de chercher à exploiter plus largement le champ ouvert par la spectroscopie en fort champ magnétique (en situation "beam-gas") en reprenant l'étude d'un système plus complexe, non encore exploré avec les possibilités de la spectroscopie hertzienne; après avoir effectué un certain nombre de spectres en champ nul, nous nous sommes arrêtés sur l'étude des configurations impaires du néon.

Lorsque nous avons entrepris nos recherches préliminaires sur le néon, les seules informations expérimentales que nous possédions alors étaient les spectres réalisés en 1919 par PASCHEN (10) et les études d'effet Zeeman

(9) A. KPNOU, V.W. HUGHES, C.E. JOHNSON, S.A. LEWIS, F.M.J. PICHANICK - Phys. Rev. Lett. 1971, 26, 1613

(10) F. PASCHEN - Ann. der Phys. 1919, 60, 405
1920, 63, 201

effectuées par GREEN (11) en 1938. L'avènement du laser a apporté une somme considérable d'informations sur les configurations paires du néon, mais les configurations impaires restaient, du point de vue expérimental, assez mal connues. Du point de vue théorique, les résultats de l'étude paramétrique effectuée par LIBERMAN (12) étaient très encourageants. Cette étude montrait que le schéma de couplage des niveaux des configurations impaires et plus particulièrement celui de la configuration $2p^54d$ semblait très proche du couplage de Racah pur. Il paraissait donc intéressant de chercher, avec les outils dont nous disposions, à apporter des informations expérimentales plus fines sur cette configuration $2p^54d$ et plus particulièrement sur la qualité du couplage intermédiaire.

En effet, les résultats de mesure de position de croisements de niveaux sont des résultats riches mais complexes. Ils contiennent à la fois des informations sur le spectre d'énergie et sur la nature du couplage des états propres. Ils apportent souvent des informations très fines sur les fonctions d'onde mais, en corollaire, leur analyse est assez délicate et l'exploitation complète des résultats pour l'obtention de paramètres fondamentaux (structures fines ou facteurs de Landé) nécessite souvent l'utilisation de résultats auxiliaires.

C'est ainsi que l'analyse de nos mesures de précision sur l'hélium a nécessité une mise au point théorique complète tant sur la structure fine de l'hélium que sur l'effet Zeeman des atomes à plusieurs électrons. Au niveau de précision requis, il est indispensable de prendre en compte l'ensemble des corrections relativistes et des corrections de recul et il nous a paru en outre indispensable d'évaluer le premier ordre des corrections radiatives.

C'est cette mise au point, préalable indispensable de l'exploitation de nos mesures sur l'hélium, que nous présentons dans la première partie de ce mémoire. Après avoir abordé le problème dans le cadre de l'électrodynamique quantique, nous l'envisageons dans un cadre classique et nous montrons que cette

(11) J.B. GREEN et J.A. PEOPLES - Phys. Rev. 1938, 54, 602
1939, 56, 54

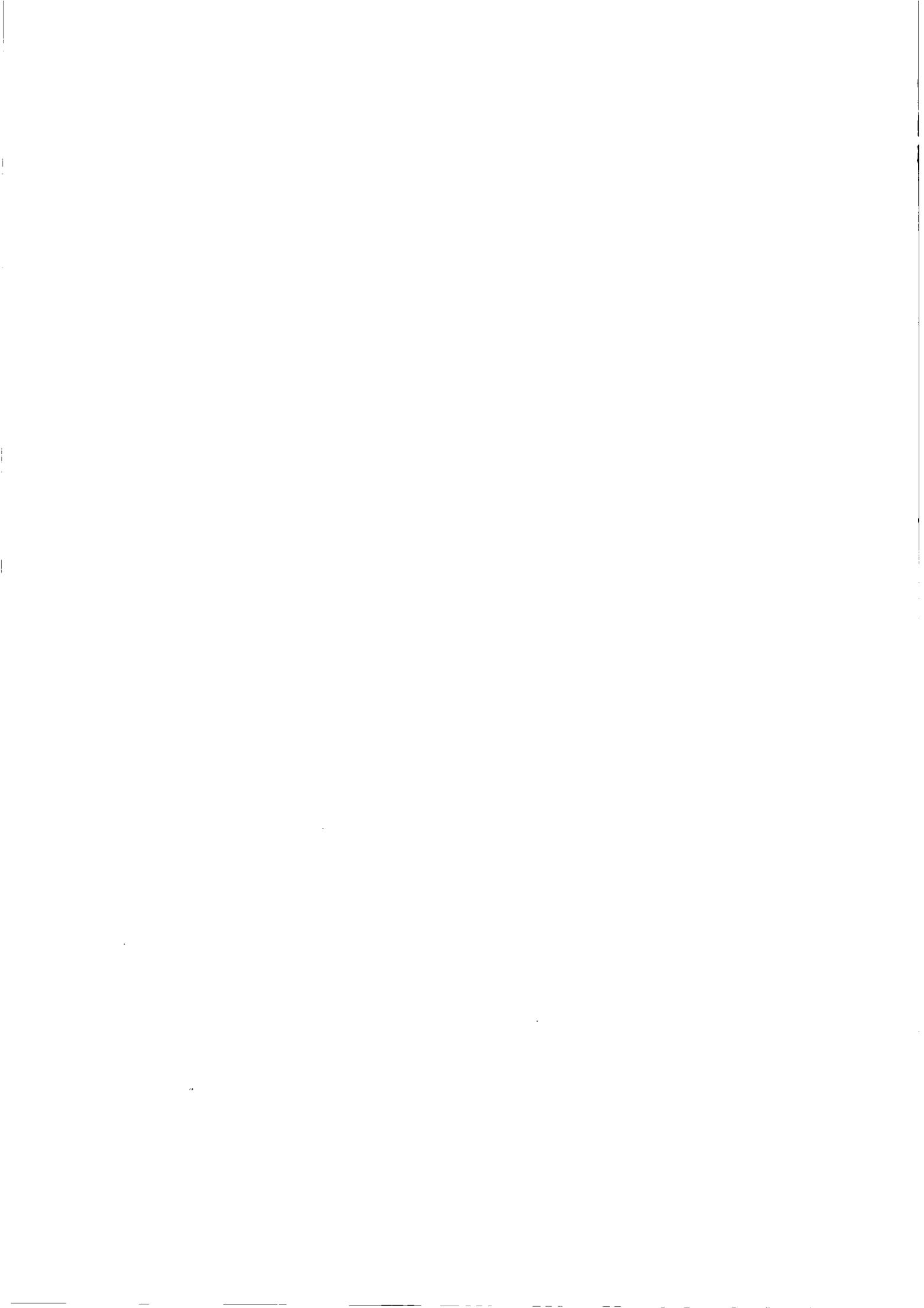
(12) S. LIBERMAN - Physica, 1973, 69, 598

démarche apporte un certain nombre d'idées physiques simples sur les effets mis en cause.

Dans la deuxième partie, nous présentons nos résultats expérimentaux sur l'hélium et leur analyse. Nous avons réussi à mesurer à 10^{-6} près la position du croisement des niveaux ($J = 0, J = 2$) du multiplet 2^3P de l'hélium, notre résultat est en accord excellent avec les informations tirées des expériences de résonance magnétique de LEWIS, PICHANICK et al. Nos résultats sur les niveaux n^3P ($n = 2, 3, 4$) nous permettent d'améliorer la précision des informations antérieures (soit sur les facteurs de Landé ($n=2$), soit sur les structures fines ($n=3$ et 4)).

La mise en oeuvre d'une telle expérience a nécessité la solution d'un grand nombre de problèmes expérimentaux, les plus délicats sont ceux qui concernent le jet atomique (stabilité) et le champ magnétique (repérage et mesure absolue). Nous exposons dans la 2ème et la 3ème partie de ce mémoire les solutions que nous avons retenues.

Dans la 4ème partie, nous présentons les résultats de nos mesures de croisements de niveaux dans la configuration $2p^54d$ du néon; ils apportent des informations neuves sur cette configuration; nous en présentons une étude phénoménologique puis une première analyse a priori qui semble mettre en évidence l'importance de l'interaction spin-orbite de l'électron externe jugée jusqu'ici négligeable.



Le montage expérimental, que nous décrivons en plus grand détail dans la troisième partie de ce mémoire, nous a permis de réaliser une mesure à 10^{-6} près de la position d'un croisement de niveau dans le multiplet 2^3P de l'hélium. Quel est l'intérêt d'une telle mesure ? Du point de vue théorique, l'intérêt est double : l'hélium est le plus simple des systèmes non hydrogénoïdes, on peut donc avoir l'ambition de calculer avec précision, dans le cadre de l'électrodynamique quantique, l'ensemble des effets dont il est le siège, en particulier les effets à plusieurs corps et d'en faire des tests expérimentaux. Le test est d'autant plus sévère que les niveaux les plus profonds de l'hélium ont des durées de vie particulièrement longues; ainsi le niveau 2^3P (qui a une durée de vie de l'ordre de 110 ns) présente de ce fait des résonances qui, en l'absence de tout autre cause d'élargissement, ont une largeur de $0,4 \text{ G}$ (soit 60 fois plus fine que les résonances du niveau 2^1P de l'hydrogène). En réalité, si on étudie le problème de façon plus critique, cette première motivation s'estompe un peu, car il apparaît qu'au niveau de précision atteint (10^{-6}), il est exclu de faire, sur des mesures de structure fine, des tests réellement cruciaux pour l'électrodynamique quantique elle-même (les intervalles de structure fine étant, contrairement au moment anormal de l'électron, très peu sensibles aux problèmes de renormalisation). Mais cette constatation autorise par ailleurs l'espoir d'obtenir une détermination extrêmement précise de la constante de structure fine α ; et c'est la raison pour laquelle il a été investi sur le sujet, dans de nombreux laboratoires, un très grand effort tant théorique (1)(2) qu'expérimental (3)(4).

Nos mesures permettent, comme nous le verrons dans le chapitre IV, de confronter un certain nombre de résultats expérimentaux et théoriques sur l'effet Zeeman de l'hélium dans des conditions expérimentales totalement différentes de celles réalisées antérieurement. Il y a lieu par ailleurs de les replacer dans le cadre des mesures de plus en plus grande précision réalisées sur l'effet Zeeman des atomes hydrogénoïdes (5), alcalins (6), héliumoïdes (7) (8)(9) et des atomes à trois électrons en couche externe (10).

L'interprétation et l'exploitation de ces résultats posent de gros problèmes qui ont motivé de très nombreux travaux théoriques récents (11 - 15). Les problèmes à résoudre sont de deux genres :

- 1°) Ceux concernant le hamiltonien de départ : comment traiter, et jusqu'à quel ordre, les effets de recul du noyau, les effets relativistes et les corrections radiatives ?
- 2°) Connaissant formellement le hamiltonien avec une précision suffisante, il reste à calculer numériquement, avec la même précision, les grandeurs accessibles à l'expérience : facteurs de Landé, position des croisements de niveaux; cela nécessite la connaissance très précise de fonctions d'ondes, ce qui à l'heure actuelle n'est le cas que des atomes héliumoides. (51)

Nous abordons le premier point dans le chapitre I où nous présentons le hamiltonien de Breit généralisé pour tenir compte des corrections radiatives proposé par R. HEGSTROM (11). Le problème des corrections relativistes a déjà été résolu depuis longtemps (12)(13) et nous insistons plus particulièrement sur le problème des corrections radiatives et des effets de recul du noyau.

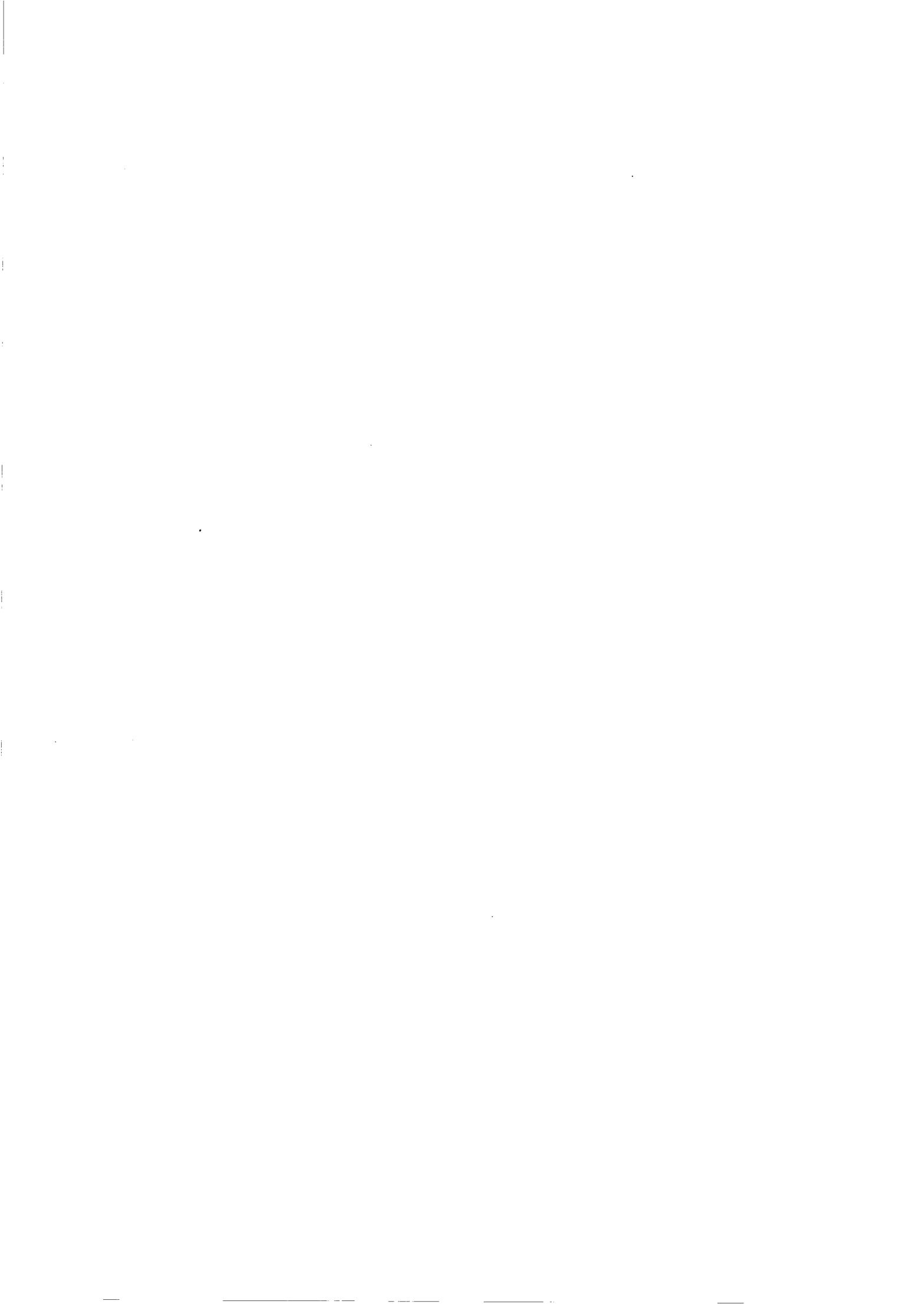
Devant la complexité des résultats obtenus, nous proposons dans le chapitre II une étude classique des diverses interactions se produisant dans un atome à plusieurs électrons doués de moments cinétiques intrinsèques. Cette approche se révèle très satisfaisante puisqu'elle permet de retrouver le hamiltonien établi au chapitre I jusqu'à l'ordre $1/c^3$ inclus; elle permet par ailleurs de jeter un éclairage complémentaire sur l'origine physique des différents termes de ce hamiltonien.

Dans le cas particulier de l'hélium, nous abordons dans le chapitre III le problème du calcul des grandeurs accessibles à l'expérience. Après avoir rappelé brièvement la symétrie des états propres des niveaux 3P de l'hélium, nous montrons que l'on peut rendre compte de son effet Zeeman à l'aide de trois paramètres de Landé g'_S , g'_L , g'_X dont nous donnons l'expression algébrique explicite ; nous en donnons une estimation dans le cadre d'une approximation hydrogénoïde, puis d'approximations tenant compte des corrélations.

Dans le chapitre IV enfin, nous donnons le principe de l'expérience que nous avons réalisée et les résultats expérimentaux obtenus. Après une étude approfondie de diverses causes possibles d'erreurs systématiques, nous montrons comment on peut exploiter ces résultats pour en tirer soit des valeurs de facteurs de Landé, soit des mesures d'intervalles de structure fine.

PREMIERE PARTIE

HAMILTONIEN ZEEMAN D'UN ATOME A PLUSIEURS
ELECTRONS.
ASPECTS THEORIQUES.



CHAPITRE I

HAMILTONIEN D'UN ATOME A PLUSIEURS ELECTRONS DANS UN CHAMP MAGNETIQUE EXTERNE INDEPENDANT DU TEMPS

Comme nous le soulignons dans l'introduction, les corrections à introduire à l'effet Zeeman classique d'un atome à plusieurs électrons ont essentiellement trois origines : corrections relativistes, corrections dues au mouvement du noyau et corrections radiatives. Le traitement ab initio le plus satisfaisant de tels effets nécessiterait le recours à la théorie des champs : à notre connaissance, cette tâche n'a été menée à bien que pour les systèmes hydrogénéoïdes (¹⁵). A défaut d'un tel traitement, HEGSTROM (¹¹) a proposé une généralisation de l'hamiltonien de Breit incluant les corrections radiatives au moment magnétique de l'électron. Pour les atomes hydrogénéoïdes (¹⁶), ce formalisme redonne (à l'ordre $\alpha^3 \mu_B H$ et $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ inclus) exactement les mêmes résultats que la théorie totalement covariante de S. BRODSKY et J. PRIMACK (¹⁵); par ailleurs, la comparaison aux résultats de M. DOUGLAS et N. KROLL (¹) montre qu'il permet également de rendre compte de la structure fine des niveaux ^{3P} de l'hélium jusqu'à l'ordre $\alpha^3 R_y$, mais non du Lamb-shift. Comme nous essaierons de le montrer par l'étude qualitative des diagrammes de Feynmann appropriés, la difficulté essentielle du modèle de Hegstrom réside dans le fait que la correction introduite est essentiellement une correction d'électron libre et qu'elle élude tous les problèmes de liaison. Suivant GROUCH (¹⁷), nous présenterons quelques termes correctifs supplémentaires, susceptibles de modifier les résultats de l'effet Zeeman à l'ordre $\alpha^3 \mu_B H$; ces termes (dont la valeur moyenne est nulle dans les états de symétrie sphérique) apparaissent comme des corrections au Lamb-shift et à l'interaction de Breit dues à la présence du champ magnétique. La présentation du hamiltonien de Hegstrom et du problème des corrections radiatives fait l'objet du paragraphe A de ce chapitre.

Le deuxième problème abordé dans le paragraphe B concerne le calcul des corrections de recul. Ce calcul nécessite une séparation soignée des variables relatives et de celles du centre de masse. Nous l'avons traité

dans l'hypothèse de mouvements d'ensemble lents dans un champ magnétique indépendant du temps ^{☆)}. Dans un champ magnétique externe, l'impulsion de l'atome n'est pas conservative, son état interne dépend de son mouvement (effet Stark motionnel, ...) et il n'est pas possible de séparer le hamiltonien de Breit en un hamiltonien interne et une énergie cinétique externe. Toutefois, dans le cas d'atomes neutres, il existe un ensemble d'observables qui commutent avec le hamiltonien, et auxquelles sont associées des constantes du mouvement. Pour chaque valeur de ces constantes, le hamiltonien restant ne dépend plus que des variables internes de l'atome, c'est ce que nous avons appelé la "quasi-séparabilité" de l'équation de Breit. Nous montrons qu'il existe une jauge particulière où ces constantes du mouvement ont une signification physique claire et que la quasi-séparation du hamiltonien de Breit est en fait équivalente à une transformation de jauge.

Dans le paragraphe C, nous écrivons enfin le développement du hamiltonien à la limite non relativiste jusqu'aux ordres $\alpha^3 R_y$, $\alpha^3 \mu_B H$, $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ inclus. Il apparaît sous cette forme que les corrections d'anomalie magnétique n'équivalent pas à remplacer le moment de Dirac de l'électron par le moment anormal, ce qui revient à dire que les divers termes bien connus du hamiltonien sous forme non relativiste sont différemment affectés par les corrections radiatives : l'étude classique du chapitre II nous permettra de jeter un autre éclairage sur ce sujet.

A. Equation de Breit et corrections radiatives

a) Equation de Breit généralisée

L'atome est traité comme un système de particules de Dirac douées de moments magnétiques intrinsèques anormaux. Suivant HEGSTROM (¹¹), nous écrivons que ce système est gouverné par une équation de Breit généralisée que nous écrivons dans le laboratoire sous la forme :

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i + \sum_{i < j} U(i, j) \quad (I-1)$$

^{☆)} Le problème des effets liés aux corrections relativistes du mouvement du centre de masse de particules en interaction avec un champ électromagnétique externe a été traité par F.E. CLOSE et H. OSBORN (¹⁸).

où

$$\mathcal{H}_i = \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i + \beta_i m_i - \kappa_i (\beta_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{H}_i - i\beta_i \vec{\alpha}_i \cdot \vec{E}_i) \quad (\text{I-2})$$

$$U(i,j) = e_i e_j r_{ij}^{-1} \left(1 - \frac{\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\alpha}_j}{2} - \frac{(\vec{\alpha}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\alpha}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{2r_{ij}^2} \right) + \beta_i \beta_j \kappa_i \kappa_j \left\{ \frac{\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{\sigma}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\sigma}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \left(\frac{8}{3} \pi \right) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \delta^3(r_{ij}) \right\} \quad (\text{I-3})$$

*)

Dans ce hamiltonien, $\vec{\pi}_i$ représente la quantité de mouvement de la particule i , e_i sa charge, m_i sa masse, \vec{r}_i sa position, \vec{p}_i son impulsion (variable conjuguée de \vec{r}_i) avec :

$$\vec{\pi}_i = \vec{p}_i - e_i \vec{A}_i \quad (\text{I-4})$$

et le choix de jauge :

$$\vec{A}_i = \frac{1}{2} (\vec{H} \wedge \vec{r}_i) \quad (\text{I-5})$$

Dans les termes correctifs à l'équation de Dirac, tenant compte de l'anomalie κ_i des moments magnétiques, les champs \vec{E}_i et \vec{H}_i représentent respectivement le champ électrique total et le champ magnétique total auxquels est soumise la particule i , soit :

$$\vec{H}_i = \vec{H} + \sum_{j \neq i} e_j \vec{\alpha}_j \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \quad (\text{I-6})$$

$$\vec{E}_i = \sum_{j \neq i} e_j \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \quad (\text{I-7})$$

κ_i représente l'anomalie du moment magnétique de la particule i , soit pour l'électron ⁽¹⁹⁾₍₂₀₎ :

$$\kappa_e = \left(-\frac{|e|}{2m_e} \right) \left(\frac{\alpha}{2\pi} - 0,32848 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^2 + 1,29 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^3 + \dots \right) = .0011596 \cdot \mu_B \quad (\text{I-8})$$

et pour le proton :

$$\kappa_p = 1.793 \frac{|e|}{2m_p}$$

*) $\vec{\alpha}$ est l'opérateur vectoriel dont les composantes cartésiennes $(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3)$ satisfont, avec l'opérateur $\alpha_4 \equiv \beta$, aux relations bien connues d'anticommutation usuelles :

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2, 3, 4)$$

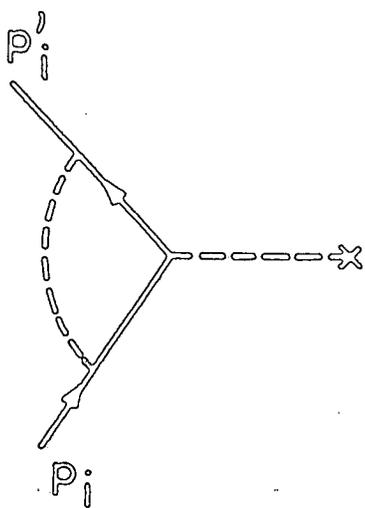
Ce hamiltonien appelle plusieurs remarques :

- 1°) Les sommations de l'équation (I-1) doivent être étendues à l'ensemble des particules constituantes de l'atome (noyau et électrons), ce qui peut paraître totalement injustifié pour tout noyau de spin différent de 1/2. Pour des noyaux de spin nul, l'étude de l'équation de Klein-Gordon et de la forme réduite non relativiste des diverses observables dans la formulation de FESHBACH et VILLARS (21) montre leur parfaite identité formelle avec la partie indépendante du spin obtenue par transformation de FOLDY-WOUTHUYSEN de l'équation de Dirac. Le problème pour des noyaux de spin $> 1/2$ a été examiné par BETHE et SALPETER (22) qui ont montré que la formulation utilisée par HEGSTROM reste correcte si l'on s'en tient aux termes de 1er ordre en m_e/m_N (m_N masse du noyau).
- 2°) Dans cette description, en ce qui concerne les corrections radiatives, tout se passe comme si l'électron était un électron libre; en particulier ce formalisme ne permet pas de rendre compte de la modification à courte distance de la loi de Coulomb, responsable du Lamb-shift. Nous savons que cet effet se manifeste par un déplacement global des niveaux de structure fine d'ordre $Z\alpha^3 R_y$, et à l'intérieur de chaque multiplet par un déplacement relatif d'ordre $\alpha^5 \text{Log } \alpha R_y$ dont nous tiendrons éventuellement compte de façon phénoménologique. En présence de champ magnétique, il apparaît dans les états de symétrie non sphériques une modification du Lamb-shift, responsable de corrections à l'effet Zeeman d'ordre $\alpha^3 \mu_B H$. Celles-ci, de même que les corrections à l'interaction de Breit, dues à la présence de champ magnétique, ont été calculées par GROTH et HEGSTROM (17).

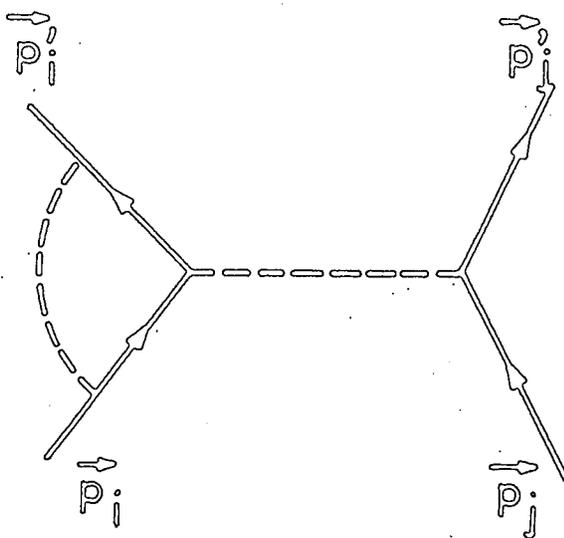
Sans vouloir entrer dans le détail de calculs complexes, il peut être intéressant d'étudier de manière qualitative les différents types d'interactions auxquelles sont associées ces corrections radiatives : c'est ce que nous essaierons de faire dans le prochain paragraphe.

b) Corrections radiatives

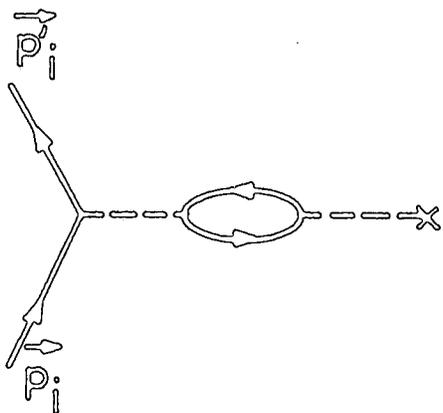
Nous ne nous intéresserons dans ce paragraphe qu'aux termes du 1er ordre en H (ne faisant intervenir qu'une interaction avec le champ magnétique externe). Envisageons tout d'abord les diagrammes de Feynman décrivant les processus radiatifs du premier ordre en H et en α (émission et réabsorption



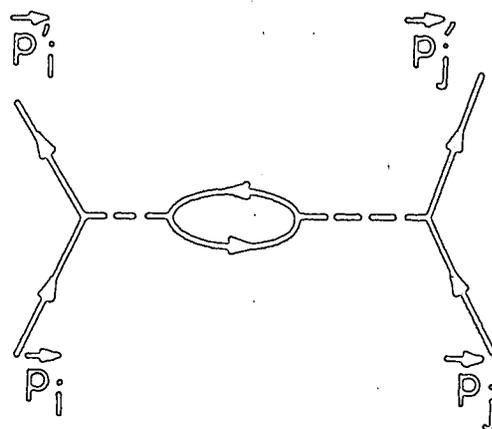
I a



I b



II a



II b

Fig - I

d'un seul photon virtuel). Les graphes irréductibles sont de deux sortes : corrections dites "de vertex ou de Lamb-shift proprement dit" (figure I-a) et correction de polarisation du vide (figure II-a).

Le graphe I-a correspond à une interaction avec le champ magnétique extérieur accompagnée d'émission et de réabsorption d'un photon virtuel. Si l'on remplace le champ extérieur par le champ des autres électrons, on obtient le diagramme de la figure I-b. Ces diagrammes sont les seuls de ce type correspondant à l'émission et l'absorption par un même électron d'un seul photon virtuel. Le calcul exact des fonctions correspondant à ces graphes renormalisés est, dans le cas d'états liés, d'une très grande complexité. L'approximation utilisée par les auteurs précédemment cités consiste à introduire une coupure k_{\min} dans le spectre des photons virtuels.

$$\alpha^2 \frac{mc}{\hbar} \ll k_{\min} < \alpha \frac{mc}{\hbar} \quad (\text{I-9})$$

Pour les photons d'impulsion supérieure à k_{\min} (c'est-à-dire d'énergie supérieure aux énergies de liaison de l'atome), le propagateur de l'électron lié peut être approximé par un propagateur d'électron libre; le graphe de la figure I-a donne l'expression usuelle de l'interaction de Pauli en l'absence de champ électrique externe :

$$- \frac{e_i}{2m_i} \frac{\alpha}{2\pi} (\beta_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{H}) \quad (\text{I-10})$$

où \vec{H} est le champ magnétique externe. De la même façon, le graphe de la figure I-b donne un terme d'interaction, covariant, de la forme :

$$\sum_{j \neq i} - \frac{e_i}{2m_i} \frac{\alpha}{2\pi} (\beta_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{H}_{ij} - i\beta_i \vec{\alpha}_i \cdot \vec{E}_{ij}) \quad (\text{I-11})$$

où \vec{H}_{ij} (resp. \vec{E}_{ij}) représente le champ magnétique (resp. électrique) instantané créé au niveau de la particule i par la particule j :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{H}_{ij} = e_j \vec{\alpha}_j \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \end{array} \right. \quad (\text{I-12})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{E}_{ij} = e_j \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \end{array} \right. \quad (\text{I-13})$$

Dans la réduction aux grandes composantes qui conduit à effectuer la substitution

$$\vec{\alpha}_j \rightarrow \vec{\pi}_j/m = \frac{\vec{p}_j - e\vec{A}_j}{m} \quad (\text{I-14})$$

l'expression du champ magnétique (I-12) reprend sa forme classique et l'on voit aisément que le terme (I-11) apporte une correction d'ordre $\alpha^3 R_y$ à la structure fine, et $\alpha^3 \mu_B H$ à l'effet Zeeman; à comparer au terme (I-10) qui est en $\alpha \mu_B H$.

Si l'on poursuit l'examen des graphes de même type (corrections de vertex) d'ordre supérieur (c'est-à-dire avec émission et absorption de plusieurs photons virtuels), on voit alors, dans la même approximation de photons d'impulsion supérieure à k_{\min} , que seules les graphes à un photon du type b contribueront aux corrections à l'effet Zeeman d'ordre inférieur ou égal à $\alpha^3 \mu_B H$. Le regroupement de l'ensemble de ces termes avec les expressions (I-10) et (I-11) justifie bien, à l'ordre $\alpha^3 \mu_B H$, la correction à l'équation de Dirac (I-2) introduite par HEGSTROM.

Remarquons incidemment que dans ce calcul la bande du spectre des photons virtuels qui contribue essentiellement à l'anomalie du moment magnétique est située autour de l'énergie mc^2 et que, moyennant la condition (I-9), le terme d'interaction est insensible à la position exacte de la coupure.

Pour les photons "mous" d'impulsion inférieure à k_{\min} , le fait que l'électron est lié devient essentiel; une approche non relativiste est possible et le problème peut être traité dans ce cadre par une théorie de perturbation du second ordre classique. Après avoir effectué les renormalisations nécessaires et après avoir soustrait le shift global du niveau (Lamb-shift), la correction se présente sous la forme d'un shift du niveau n d'ordre $\alpha^3 \mu_B H$ qui se met sous la forme :

$$\delta E_i^{(1)} = - \frac{e_i \alpha}{\pi m_i^3 c^2} \sum_m \left(\text{Log} \frac{m_i c^2}{2|\epsilon_n - \epsilon_m|} \right) \vec{H} \cdot \langle n | \vec{p}_i | m \rangle \wedge \langle m | \vec{p}_i | n \rangle \quad (\text{I-15})$$

La contribution essentielle à cette sommation provient des photons virtuels du domaine spectral $E \gtrsim \alpha^2 mc^2$ et moyennant la condition (I-9) est largement insensible à la définition exacte de k_{\min} .

Ayant considéré les corrections de vertex, il y a lieu de se demander si les graphes de polarisation du vide (fig. II-a et b) peuvent apporter des corrections aux interactions avec le champ magnétique. D'après les auteurs précités (17), le calcul montre que les seules corrections apportées par ces graphes sont très inférieures à $\alpha^3 \mu_B H$.

Dans tout ce qui précède, l'interaction entre particules chargées a été considérée comme instantanée ou en d'autres termes, en utilisant la jauge de Coulomb pour décrire les échanges de photons traduisant l'interaction électromagnétique entre les diverses particules, seuls les échanges de photons longitudinaux ont été pris en compte. L'échange d'un seul photon transversé est décrit par le terme classique d'interaction de Breit (I-3). En présence de champ magnétique, il apparaît une correction du propagateur associé au terme de Breit due également aux photons "mous", qui peut être traitée d'une manière classique par perturbation du second ordre et donne un shift :

$$\delta E_{ij}^{(2)} = - \frac{e_i \alpha}{\pi m_i^3 c^2 m} \sum \left(\log \frac{m_i c^2}{2(\epsilon_n - \epsilon_m)} \right) \vec{H} \cdot \left[\langle n | \vec{p}_i | m \rangle \wedge \langle m | \vec{p}_j | n \rangle + \langle n | \vec{p}_j | m \rangle \wedge \langle m | \vec{p}_i | n \rangle \right] \quad (I-16)$$

Regroupant les 2 contributions (I-15) et (I-16) pour chaque particule i , on trouve un shift du niveau n d'ordre $\alpha^3 \mu_B H$ qui s'écrit sous la forme :

$$\Delta E = - \frac{e_i \alpha}{\pi m_i^3 c^2 m} \sum \left(\log \frac{m_i c^2}{2|\epsilon_n - \epsilon_m|} \right) \vec{H} \cdot \langle n | \vec{P} | m \rangle \wedge \langle m | \vec{P} | n \rangle \quad (I-17)$$

où $\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i$ est la somme des impulsions des électrons. Ce terme disparaît dans les états S à symétrie sphérique, mais il y a lieu d'en tenir compte dans les états de moment orbital non nul.

Notre point de départ sera donc l'équation de Breit modifiée (I-1) censée décrire l'interaction de l'atome avec le champ magnétique jusqu'à l'ordre $\alpha^3 \mu_B H$ et $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ (inclus). Le terme (I-17) sera envisagé comme une perturbation; évalué comme tel au chapitre III, nous montrerons qu'il est négligeable au niveau de précision souhaité, soit le ppm.

B. La séparation des variables du centre de masse

Le calcul correct des corrections de recul jusqu'à l'ordre $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ nécessite une étude soignée du problème de la séparation des variables internes et de celles du centre de masse. L'origine des difficultés est double.

- 1°) Le hamiltonien de Breit (I-1) n'est pas séparable en opérateurs agissant exclusivement soit sur les variables du centre de masse, soit sur les variables internes; en particulier, il présente des termes croisés faisant intervenir conjointement l'impulsion \vec{P} (variable conjuguée de la position \vec{R} du centre de masse) et les variables internes. Ceci implique que l'état interne de l'atome dépend de son mouvement d'ensemble; cette idée a priori n'a rien de choquant et est à l'origine de phénomènes physiques très simples parfaitement bien compris, tel l'effet Stark motionnel ressenti par un atome se déplaçant dans un champ magnétique constant H.
- 2°) Toutefois le traitement de cet effet est a priori particulièrement compliqué dans le cadre de l'équation de Breit telle qu'elle a été écrite en (I-1); en anticipant sur les résultats du paragraphe b), il apparaît que cette difficulté est liée au fait que \vec{P} , dans la jauge choisie en (I-5), n'a pas de signification physique claire.

La solution de ce problème telle qu'elle a été présentée par HEGSTROM relève en fait d'une idée centrale : la recherche d'états propres du système global qui soient également des états stationnaires du mouvement d'ensemble de l'atome (paramétrés par un ensemble $\{ \vec{K} \}$). Si ce problème a une solution, le hamiltonien décrivant l'état interne de l'atome se réduit sur cette base à un opérateur $\mathcal{H}_{\{\vec{K}\}}$ n'agissant que sur les variables internes, l'état interne de l'atome n'est pas pour autant découplé du mouvement d'ensemble mais il n'en dépend plus que par l'intermédiaire des paramètres $\{ \vec{K} \}$ (qui sont des nombres et non pas des opérateurs). Le problème de l'état interne de l'atome peut donc, dans cette base, être résolu entièrement en fonction des coordonnées internes et des paramètres $\{ \vec{K} \}$. Suivant HEGSTROM, nous montrerons ainsi dans le paragraphe a que pour un atome neutre, le hamiltonien de Breit est effectivement "quasi-séparable". Dans le paragraphe b, nous montrerons en fait que cette démarche est l'équivalent d'une transformation de jauge ayant une signification physique claire.

a) "Quasi-séparabilité" du Hamiltonien de Breit (I-1)

Dans tout ce qui suit, nous utilisons les définitions classiques des coordonnées du centre de masse \vec{R} et des coordonnées \vec{r}_{in} . Nous insistons sur le fait que ce formalisme n'est pas approprié à l'étude des mouvements d'ensembles relativistes; il est en effet évident que pour étudier de tels mouvements, il est nécessaire d'utiliser une définition intrinsèque des coordonnées internes (c'est-à-dire de les mesurer dans le référentiel propre de l'atome) et de prendre une définition relativiste du centre d'énergie. Ce problème a été étudié par de nombreux auteurs (18)(23)(24)(25). Nous retiendrons simplement le fait que la formulation la plus commode du problème consiste alors à utiliser un hamiltonien de Breit avec substitution minimale ^{☆)} dans le référentiel du centre de masse, et nous nous en tiendrons dans ce qui suit à l'étude de mouvements d'ensemble lents, ne conservant dans le résultat final que les terme d'ordre le plus bas en V/C (V vitesse du centre de masse).

Dans le cadre d'un mouvement d'ensemble non relativiste, nous définissons donc le centre de masse R et les variables internes \vec{r}_{in} par :

$$\vec{R} = \sum_i \frac{m_i}{M} \vec{r}_i \quad (\text{I-18})$$

Dans cette équation, comme dans tout ce qui suit, sauf indications contraires, l'indice i décrit l'ensemble des particules constituantes de l'atome, électrons et noyaux compris.

$$\vec{r}_{in} = \vec{r}_i - \vec{r}_n \quad (\text{I-19})$$

A priori, l'indice n peut servir à particulariser n'importe quelle particule de l'atome ou de la molécule envisagée; dans notre cas, le choix le plus naturel est bien sûr celui du noyau.

☆)

La "substitution minimale" se réfère à la prise en compte des interactions électromagnétiques externes grâce au terme d'interaction $e\phi$ et à la substitution de $p'_i - e_i A_i$ à p_i (en anglais "minimally coupled").

Nous aurons, dans ce qui suit, l'occasion d'utiliser les relations inverses qui s'écrivent :

$$\vec{r}_n = \vec{R} - \sum_{j \neq n} \frac{m_j}{M} \vec{r}_{jn} \quad (\text{I-20})$$

$$\vec{r}_i = \vec{R} + \vec{r}_{in} - \sum_{j \neq n} \frac{m_j}{M} \vec{r}_{jn} \quad (\text{I-21})$$

Les moments conjugués des coordonnées \vec{R} et \vec{r}_{in} (respectivement \vec{V}_R et $\vec{V}_{r_{in}}$) qui définissent les impulsions généralisées sont respectivement \vec{P} et \vec{p}_{in} :

$$\vec{P} = \sum \vec{p}_i \quad (\text{I-22})$$

$$\vec{p}_{in} = \vec{p}_i - \frac{m_i}{M} \sum_j \vec{p}_j \quad (i \neq n) \quad (\text{I-23})$$

d'où l'on tire les relations inverses :

$$\vec{p}_n = \frac{m_n}{M} \vec{P} - \sum_{j \neq n} \vec{p}_{jn} \quad (\text{I-24})$$

$$\vec{p}_i = \frac{m_i}{M} \vec{P} + \vec{p}_{in} \quad (\text{I-25})$$

Il importe de remarquer que l'impulsion généralisée \vec{P} , dans la jauge définie en (I-5) n'est pas une constante du mouvement. Dans cette jauge, la quantité conservative est \vec{Q} définie par :

$$\vec{Q} = \sum_i (\vec{p}_i + e_i \vec{A}_i) = \vec{P} + \sum e_i \vec{A}_i \quad (\text{I-26})$$

(On remarquera qu'il ne s'agit pas de la quantité de mouvement $\vec{\pi} = \sum_i (\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i)$).

La démonstration de cette propriété, qui ne présente aucune difficulté essentielle, n'est pas immédiate : nous la donnons in extenso ci-dessous (les étapes ultérieures du raisonnement qui reposent sur des arguments analogues ne seront pas explicitées).

Reprenons pour cela l'expression (I-1) de \mathcal{H} , il apparaît que $[\mathcal{H}, \vec{Q}]$ se réduit à :

$$[\mathcal{H}, \vec{Q}] = \sum_i [\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i, \vec{Q}] \quad (\text{I-27})$$

En effet, tous les termes éliminés ne font intervenir que les opérateurs de spin et les variables électroniques internes

\vec{r}_{in} : par suite ils commutent avec $\sum_i e_i \vec{A}_i$ (qui ne dépend que des variables de position des i particules) et avec \vec{P} (la distance entre particules ne changeant pas dans une translation globale), et donc avec \vec{Q} (d'après (I-14)).
Développant ensuite $\vec{\pi}_i$ et \vec{Q} , le commutateur (I-27) devient :

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, \vec{Q}] &= \sum_{i,j} e_j [\vec{\alpha}_i \vec{p}_i, \vec{A}_j] - \sum_{i,j} e_i [\vec{\alpha}_i \vec{A}_i, \vec{p}_j] \\ &= \sum_{i,j} e_j \left\{ [\vec{\alpha}_i \vec{p}_i, \vec{A}_j] - [\vec{\alpha}_j \vec{A}_j, \vec{p}_i] \right\} \\ &= \sum_{i,j} e_j \vec{E}(j,i) \end{aligned} \quad (I-28)$$

$\vec{E}(j,i)$ est un opérateur vectoriel dont nous explicitons la composante n sous la forme :

$$E_n(j,i) = \sum_m [\alpha_{im} p_{im}, A_{jn}] - [\alpha_{jm} A_{jm}, p_{in}] \quad (I-29)$$

(p_{im} représente la composante m de l'impulsion \vec{p}_i de la particule i , A_{jn} la composante n du potentiel vecteur $\vec{A}_j = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}_j$, qui ne dépend que de \vec{r}_j , position de la particule j).

Compte tenu de la relation de commutation classique :

$$[x_{im}, p_{jn}] = i \delta_{ij} \delta_{mn} \quad (I-30)$$

$$E_n(j,i) = E(i,i) \delta(i,j)$$

Introduisons alors le tenseur totalement antisymétrique à 3 dimensions ϵ_{abc} égal à la signature de la permutation des indices, soit :

$$\begin{cases} \epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} = -\epsilon_{xzy} = -\epsilon_{yxz} = -\epsilon_{zyx} = 1 \\ \epsilon_{abc} = 0 \text{ si deux quelconques des indices } a, b, c \text{ sont} \\ \text{identiques.} \end{cases} \quad (I-31)$$

Le potentiel vecteur peut alors s'écrire sous la forme :

$$A_{ia} = \frac{1}{2} \epsilon_{abc} H_b r_{ic}$$

d'où, avec la convention de sommation

des indices répétés et en utilisant le fait que α_{im} n'agit que sur le spin :

$$E_n(j,i) = \frac{1}{2} H_\lambda \delta(i,j) \alpha_{im} \left\{ \left[p_{im} \epsilon_{nlk} r_{ik} \right] - \left[\epsilon_{mlk} r_{ik} p_{in} \right] \right\}$$

Utilisant (I-30), il vient :

$$\begin{aligned} E_n(j,i) &= \frac{1}{2} \delta(i,j) H_\lambda \alpha_{im} \left\{ -\epsilon_{nlk}(i) \delta_{mk} - \epsilon_{mlk}(i) \delta_{kn} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \delta(i,j) H_\lambda \alpha_{im}(i) \left\{ -\epsilon_{nlm} - \epsilon_{mln} \right\} \\ &= 0 \quad \text{d'après (I-31)} \end{aligned}$$

Il en résulte d'après (I-28) que dans le cadre de validité de l'équation de Breit (I-1), \vec{Q} est une constante du mouvement.

De la même façon, l'on peut évaluer les commutateurs des composantes de \vec{Q} :

$$[Q_r, Q_s] = -i \epsilon_{rst} H_t \Sigma e_i \quad (\text{I-32})$$

Si le système envisagé est neutre ($\Sigma e_i = 0$), les composantes de \vec{Q} commutent. \mathcal{H} et \vec{Q} constituent alors un ensemble d'observables qui commutent et la fonction d'onde peut être choisie comme fonction propre simultanée de ces opérateurs de valeurs propres E et \vec{K} :

$$\begin{cases} \mathcal{H} \psi = E \psi & (\text{I-33}) \\ \vec{Q} \psi = \vec{K} \psi & (\text{I-34}) \end{cases}$$

Cette dernière équation peut alors se mettre sous la forme :

$$-i \vec{\nabla}_R \psi = (\vec{K} - \Sigma e_i \vec{A}_i) \psi \quad (\text{I-35})$$

Or, pour un système neutre, $\Sigma e_i \vec{A}_i$ est indépendant du choix de l'origine des coordonnées, donc en particulier de \vec{R} . La dépendance en R de la fonction propre ψ peut donc s'explicitier aisément sous la forme :

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}_{1n} \dots \vec{r}_{in} \dots) = \phi(\vec{r}_{1n}, \dots \vec{r}_{in} \dots) e^{i\vec{K}' \cdot \vec{R}} \quad (\text{I-36})$$

$$\text{avec } \vec{K}' = \vec{K} - \Sigma e_i \vec{A}_i$$

Faisant agir le hamiltonien (I-1) sur (I-36), on obtient, après un calcul sans difficultés, une équation d'évolution de ϕ qui peut se mettre sous la forme :

$$\mathcal{H}' \phi = E \phi \quad (\text{I-37})$$

\mathcal{H}' se déduisant de \mathcal{H} par substitution à la quantité de mouvement $\vec{\pi}_i$ de la particule i , de la quantité $\vec{\pi}'_i$ définie par :

$$\begin{aligned}
 \vec{\pi}'_i &= \vec{p}_i - e_i \vec{A}_{in} = \frac{m_i}{M} \vec{p} + \vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in} \quad \text{pour } i \neq n \\
 \vec{\pi}'_n &= \vec{p}_n - \sum_{j \neq n} e_j \vec{A}_{jn} = \frac{m_n}{M} \vec{p} - \sum_{j \neq n} \vec{p}_{jn} - \sum_{j \neq n} e_j \vec{A}_{jn}
 \end{aligned} \tag{I-38}$$

où :

$$\vec{A}_{in} = \frac{1}{2} \vec{H} \wedge \vec{r}_{in} \tag{I-39}$$

Le hamiltonien \mathcal{H}' régissant l'état interne de l'atome ne dépend plus alors que des variables dynamiques internes et du paramètre \vec{K} .

b) Transformation de jauge

La démarche du paragraphe précédent est équivalente à une transformation de jauge qu'il est intéressant d'explicitier, car d'une part elle peut s'adapter au problème de particules chargées et d'autre part elle permet de jeter un autre éclairage sur le problème.

Cette transformation de jauge (translation dans l'espace des moments) est définie par :

$$\mathcal{H}' = U^{-1} \mathcal{H} U \tag{I-40}$$

$$U = \exp \left(- i \sum e_i \vec{A}_i \cdot \vec{R} \right)$$

ou encore, compte tenu de la définition (I-5) de \vec{A}_i , $\vec{A}_i = \frac{1}{2} (\vec{H} \wedge \vec{r}_i)$

$$U = \exp \left(+ i \vec{A}(R) \cdot \sum e_i \vec{r}_i \right) \tag{I-41}$$

Tous les opérateurs ne dépendant que des variables de position (\vec{r}_i, \vec{R}) sont inchangés dans cette transformation de jauge; seuls sont modifiés les opérateurs dépendant des impulsions des particules, en particulier la quantité de mouvement $\vec{\pi}_i$ est transformée en :

$$\begin{aligned}
 \vec{\pi}'_i &= e^{i \sum e_j \vec{A}_j \cdot \vec{R}} \vec{\pi}_i e^{-i \sum e_j \vec{A}_j \cdot \vec{R}} \\
 &= \vec{\pi}_i + i \left[\sum e_j \vec{A}_j \cdot \vec{R}, \vec{\pi}_i \right] \\
 &= \vec{\pi}_i - \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \left(\sum e_j \vec{A}_j \cdot \vec{R} \right)
 \end{aligned}$$

expression qui se met, compte tenu des relations (I-18) à (I-25), sous la forme :

$$= \vec{p}_i - e_i \left[A(\vec{r}_i) - A(\vec{R}) \right] - \frac{m_i}{M} \sum e_j \vec{A}_j \quad (\text{I-42})$$

il y a lieu de remarquer que pour un système neutre cette équation se réduit exactement aux équations (I-38).

L'intérêt de cette nouvelle jauge, pour l'étude d'un système neutre, découle des 2 propriétés suivantes :

1°) La quantité de mouvement transformée $\vec{\pi}'_i$ qui, compte tenu de (I-22) et (I-23), s'écrit sous la forme :

$$\begin{cases} \vec{\pi}'_i = \vec{p}_i - e_i \vec{A}_{in} & \text{pour } i \neq n \\ \vec{\pi}'_n = \vec{p}_n - \sum_j e_j \vec{A}_{jn} \end{cases} \quad (\text{I-43})$$

$$\text{où } \vec{A}_{in} = \frac{1}{2} \vec{H} \wedge \vec{r}_{in}$$

ne dépend plus de \vec{R} ; il en est par suite de même pour \mathcal{H}' . Le hamiltonien récupère ainsi l'invariance par translation que le choix de la jauge (I-5) lui avait malencontreusement enlevée et il y a alors découplage du mouvement du centre de masse et de l'état interne.

2°) Comme corollaire, il apparaît que le transformé de la constante du mouvement \vec{Q} introduite en (I-26) est alors précisément égal à l'impulsion totale :

$$U^{-1} \vec{Q} U = \sum \vec{p}_i$$

La transformation unitaire conservant les relations de commutation, ceci implique que dans cette nouvelle jauge, l'impulsion totale \vec{P} , variable conjuguée du centre de masse, devient une constante du mouvement (nous conserverons dans tout ce qui suit la notation \vec{K} pour les valeurs propres de cette constante du mouvement). Cette transformation fait disparaître la difficulté soulevée dans le point n° 2 de l'introduction et redonne à \vec{P} une signification "purement cinématique"; en particulier, on retrouve immédiatement l'énergie cinétique de translation du centre de masse sous la forme :

$$\frac{P^2}{2M} \quad (M \text{ masse totale du système neutre})$$

Pour un système chargé, les propriétés 1 et 2 ne sont plus vérifiées, le hamiltonien n'est plus quasi séparable et il est impossible de traiter correctement l'état interne de l'atome sans une analyse sérieuse du mouvement du centre de masse. Toutefois, cette transformation de jauge reste particulièrement astucieuse; elle permet en particulier de séparer l'effet "global" du champ sur le système chargé en mouvement sous la forme :

$$\frac{(\vec{P} - (\sum e_i) \vec{A}(\vec{R}))^2}{2M}$$

ce qui représente l'énergie cinétique classique d'un point matériel d'impulsion \vec{P} , de masse M (masse totale du système) et de charge $\rho = \sum e_i$ (charge totale du système) dans un champ H uniforme.

Comme cela peut être montré d'une façon plus générale pour un grand nombre d'autres problèmes (par exemple tous les problèmes concernant l'interaction de systèmes atomiques ou moléculaires entre eux et avec le champ électromagnétique (26)), cette transformation de jauge s'avère précieuse pour séparer dans le hamiltonien d'interaction les effets qui concernent globalement l'atome (mouvement d'ensemble, interaction avec d'autres systèmes) des effets plus spécifiquement internes.

C. Hamiltonien à la limite non relativiste

a) Le hamiltonien réduit exprimé en fonction des variables du laboratoire

Le hamiltonien de Breit dans la nouvelle jauge doit ensuite être réduit à sa forme non relativiste, à l'aide d'une transformation de Foldy-Wouthuysen (dont la généralisation pour un système à plusieurs électrons est due à CHRAPLYVY (27), BARKER et GLOVER (28)).

La complication formelle qui en résulte est justifiée par le fait que l'on connaît, pour les atomes les plus légers, de très bonnes fonctions d'ondes non relativistes, sur la base desquelles on peut effectuer tous les calculs relativistes par une méthode de perturbation.

Dans ce qui suit, nous abandonnons la notation "prime" pour simplifier l'écriture des différents termes; il importe toutefois de ne pas oublier la nouvelle définition des quantités de mouvement donnée sous sa forme générale en (I-42) et sous sa forme particulière en (I-38). Moyennant ces définitions, le hamiltonien réduit prend la forme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_i m_i c^2 + \sum_{n=0}^7 \mathcal{H}_n \\
\mathcal{H}_0 &= \sum_i \frac{\pi_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} \\
\mathcal{H}_1 &= - \sum_i \frac{\pi_i^4}{8m_i^3 c^2} \\
\mathcal{H}_2 &= - \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{\pi_i \pi_j}{m_i c^2} (g_i - 1) \mu_{oi} \delta^3(\vec{r}_{ij}) \\
\mathcal{H}_3 &= - \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_i c^2} (g_i - 1) \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot (\vec{r}_{ij} \times \vec{\pi}_i) \\
\mathcal{H}_4 &= \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_j c^2} g_i \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot (\vec{r}_{ij} \times \vec{\pi}_j) \\
\mathcal{H}_5 &= - \sum_i g_i \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \vec{H} \left(1 - \frac{\pi_i^2}{2m_i^2 c^2}\right) - \sum_i (g_i - 2) \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \left(\frac{\pi_i^2 - \vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_i}{2m_i^2 c^2}\right) \cdot \vec{H} \\
\mathcal{H}_6 &= - \sum_{i<j} \frac{e_i e_j}{2m_i m_j c^2} \left[r_{ij}^{-1} \vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_j + r_{ij}^{-3} (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\pi}_j) (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\pi}_i) \right] \\
\mathcal{H}_7 &= - \sum_{i<j} \frac{g_i \mu_{oi} g_j \mu_{oj}}{c^2} \left[\left(\frac{8}{3} \pi\right) \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \delta^3(r_{ij}) + r_{ij}^{-5} (3 \vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij} \vec{s}_j \cdot \vec{r}_{ij} - \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j r_{ij}^2) \right]
\end{aligned} \tag{I-44}$$

Dans cette expression, μ_{oi} représente le moment magnétique de la particule i : $e_i/2m_i$, soit pour un électron le magnétron de Bohr $\frac{e}{2m_e}$ (< 0); le facteur de Landé g_i de la particule i est relié à l'anomalie κ_i du moment magnétique introduit en (I-1) par la relation

$$g_i \mu_{oi} = 2 (\mu_{oi} + \kappa_i)$$

Chacun des termes, apparaissant dans le hamiltonien réduit, possède une signification physique simple : \mathcal{H}_0 est le hamiltonien classique de Schrödinger, \mathcal{H}_1 représente la première correction relativiste à l'expression de l'énergie cinétique, \mathcal{H}_2 est le terme de Darwin, \mathcal{H}_3 représente l'interaction spin-orbite, \mathcal{H}_4 l'interaction spin-autre-orbite, \mathcal{H}_5 l'interaction des spins avec le champ magnétique externe, \mathcal{H}_6 l'interaction orbite-orbite, \mathcal{H}_7 l'interaction spin-spin. Toutefois, il apparaît dans cette formulation qu'on ne peut tenir compte des corrections radiatives en remplaçant brutalement, dans le hamiltonien de Pauli, le moment magnétique des particules de Dirac $2\mu_{oi} \vec{s}_i$ par le moment anormal $g_i \mu_{oi} \vec{s}_i$, ce qui nous rappelle que la forme familière de (I-44) recouvre des phénomènes physiques d'origines différentes.

Plusieurs analyses de ce hamiltonien sont possibles, la plus puissante et la plus fondamentale est celle de l'électrodynamique quantique relativiste : suivant cette voie, DOUGLAS et KROLL (8) sont amenés à distinguer, dans les contributions relativistes d'ordre le plus bas (termes en $\alpha^4 mc^2$ de la structure fine), les termes correspondant à l'échange de photons longitudinaux entre particules (interaction coulombienne instantanée) et ceux correspondant à l'échange de photons transverses (dont le premier est à l'origine de l'interaction de Breit) et il apparaît que chacune de ces classes de contributions se comporte de façon différente vis-à-vis des corrections radiatives.

Il nous a semblé intéressant d'analyser ce hamiltonien d'un point de vue complètement différent, relativiste mais semi-classique, où les atomes sont considérés comme des systèmes de particules classiques douées de moment cinétique et magnétique intrinsèques. Nous montrerons, dans le chapitre II, que cette démarche permet de retrouver -au terme de Darwin près- le hamiltonien (I-44) et de donner une idée physique simple de l'ensemble des phénomènes mis en cause.

Avant d'aborder ce point, il y a lieu d'achever d'explicitier le hamiltonien (I-44) en fonction des grandeurs mesurables dans une expérience, à savoir les variables internes et les variables du centre de masse.

b) Le hamiltonien réduit en fonction des variables internes

Pour obtenir l'expression du hamiltonien non relativiste en fonction des variables internes et des variables du centre de masse, il suffit de remplacer les $\vec{\pi}_i$ de (I-44) par leur expression donnée en (I-38). Le hamiltonien apparaît alors comme la somme de termes ne dépendant que des variables internes et de termes faisant intervenir les paramètres du centre de masse.

On obtient ainsi par exemple pour le terme d'énergie cinétique :

$$T = \frac{K^2}{2M} - \frac{\vec{K}}{M} \wedge \vec{H} \cdot \sum e_i \vec{r}_{in} + \sum_{i \neq n} \frac{(\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})^2}{2m_i} + \frac{1}{2m_n} \left(\sum_{j \neq n} (\vec{p}_{jn} + e_j \vec{A}_{jn}) \right)^2 \quad (\text{I-45})$$

L'interprétation de chacun de ces termes est parfaitement évidente, on reconnaît l'énergie cinétique du mouvement d'ensemble, l'énergie cinétique relative des électrons et du noyau, et l'effet Stark motionnel. Comme nous l'avons déjà souligné (page 4), les termes relativistes qui dépendent de la vitesse du centre de masse n'ont pas été traités de façon satisfaisante et ne doivent pas être pris en compte dans ce calcul.

A partir de maintenant, nous considérerons donc le problème d'un atome au repos ($\vec{K} = 0$), le problème des perturbations dues au mouvement réel de l'atome sera rediscuté ab initio après la présentation de nos conditions d'expériences et de nos résultats; nous confirmerons alors le bien fondé de notre hypothèse de travail.

On trouve alors, en retenant les termes jusqu'à l'ordre $1/m_n$ seulement (note 1, page 6) et en désignant par μ la masse réduite

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i \neq n} \frac{p_{in}^2}{2\mu} + \frac{1}{2m_n} \sum_{\substack{i \neq n \\ j \neq n}} \vec{p}_{in} \cdot \vec{p}_{jn} - \sum_{i \neq n} \frac{\vec{p}_{in} \cdot e_i \vec{A}_{in}}{m_i} + \frac{1}{m_n} \sum_{\substack{i \neq n \\ j \neq n}} \vec{p}_{jn} \cdot e_i \vec{A}_{in} \\ + \sum_i \frac{(e_i \vec{A}_{in})^2}{2m_i} + \frac{1}{2m_n} \sum_{i,j} (e_i \vec{A}_{in})(e_j \vec{A}_{jn}) + \sum_{i < j} \frac{e_i e_j}{r_{ij}}$$

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{i \neq n} \frac{(\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})^4}{8m_i^3 c^2}$$

$$\mathcal{H}_2 = - \sum_{i \neq n} \sum_{j \neq i} \frac{\pi e_j}{m_i c^2} (g_i^{-1}) \mu_{oi} \delta^3(\vec{r}_{ij})$$

$$\mathcal{H}_3 = - \sum_{i \neq n} \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_i c^2} (g_i^{-1}) \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij} \wedge (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in}) \quad (\text{I-46})$$

$$\mathcal{H}_4 = + \sum_{i \neq n} \sum_{\substack{j \neq i \\ j \neq n}} \frac{e_j}{m_j c^2} g_i \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij} \wedge (\vec{p}_{jn} - e_j \vec{A}_{jn}) \\ - \sum_{i \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{e_n}{m_n c^2} g_i \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij} \wedge (\vec{p}_{kn} + e_k \vec{A}_{kn})$$

$$\mathcal{H}_5 = - \sum_{i \neq n} g_i \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \vec{H} \left\{ 1 - \frac{(\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})^2}{2m_i^2 c^2} \right\} \\ - \sum_{i \neq n} (g_i^{-2}) \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \frac{(\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})^2 - (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})(\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in})}{2m_i^2 c^2} \cdot \vec{H}$$

$$\mathcal{H}_6 = - \sum_{\substack{i < j \\ i, j \neq n}} \frac{e_i e_j}{2m_i m_j c^2} \left\{ r_{ij}^{-1} (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in}) \cdot (\vec{p}_{jn} - e_j \vec{A}_{jn}) + r_{ij}^{-3} \left(\vec{r}_{ij} \cdot (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in}) \right) \left(\vec{r}_{ij} \cdot (\vec{p}_{jn} - e_j \vec{A}_{jn}) \right) \right\} \\ + \sum_{\substack{i \neq n \\ k \neq n}} \frac{e_i e_n}{2m_i m_n c^2} \left\{ r_{in}^{-1} (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in}) \cdot (\vec{p}_{kn} + e_k \vec{A}_{kn}) + r_{in}^{-3} \left(\vec{r}_{in} \cdot (\vec{p}_{in} - e_i \vec{A}_{in}) \right) \left(\vec{r}_{in} \cdot (\vec{p}_{kn} + e_k \vec{A}_{kn}) \right) \right\}$$

\mathcal{H}_7 tel qu'en (I-44).

Nous avons ainsi dans ce système (I-46) tous les éléments pour traiter la structure fine et le hamiltonien Zeeman respectivement jusqu'aux ordres $\alpha^5 mc^2$, $\alpha^4 \frac{m}{M} c^2$, $\alpha^3 \mu_B H$, $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$, $\frac{(\mu_B H)^2}{\alpha^2 mc^2}$, $\frac{m}{M} \frac{(\mu_B H)^2}{\alpha^2 mc^2}$.

Le problème de la structure fine ne nous concerne qu'indirectement par les propriétés de symétrie des fonctions d'ondes propres de l'hélium (problème que nous aborderons dans le chapitre III). Nous limiterons donc nos commentaires sur ce sujet qui a été étudié par de multiples auteurs (les articles les plus approfondis sur ce sujet sont ceux de M. DOUGLAS ⁽²⁹⁾ pour les corrections de recul jusqu'à l'ordre $\alpha^4 \frac{m}{M} c^2$, et de DOUGLAS et KROLL ⁽¹⁾ pour l'étude des opérateurs de corrections relativistes et radiatives jusqu'à l'ordre $\alpha^6 mc^2$; la résolution numérique du problème et l'étude des fonctions d'ondes de l'état 2^3P de l'hélium est résumée dans les références ⁽²⁾ ⁽³⁰⁾).

Reprenant l'expression (I-45) du hamiltonien non relativiste, nous nous proposons donc d'explicitier plus clairement le hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique statique.

c) Le hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique statique

Après extraction des différents termes dépendant du champ de l'équation (I-46), le hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique se présente sous la forme :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_{\text{orb}} + \mathcal{H}_{\text{oo}} + \mathcal{H}_{\text{sp}} + \mathcal{H}_{\text{sp.o}} + \mathcal{H}_Q \quad (\text{I-47})$$

On peut distinguer dans ce hamiltonien cinq effets principaux :

- l'action directe du champ sur le mouvement orbital des atomes, \mathcal{H}_{orb}
- la modification de l'interaction orbite-orbite, \mathcal{H}_{oo}
- l'action sur les spins, \mathcal{H}_{sp}
- la modification de l'interaction spin orbite, $\mathcal{H}_{\text{sp.o}}$
- et enfin les effets quadratiques, \mathcal{H}_Q (effets diamagnétiques ...)

(en ce qui concerne les effets quadratiques en champ, seuls les termes d'ordre le plus bas en α doivent être retenus dans (I-46); en effet, nous avons successivement négligé dans le hamiltonien de départ les termes quadratiques en $(\mu_B \vec{s}_i \cdot \vec{H})^2$ et toutes les corrections radiatives faisant intervenir deux diffusions sur le potentiel extérieur).

Ayant en vue les calculs qui seront effectués ultérieurement sur ce hamiltonien d'interaction, nous le réécrivons en unités atomiques. Nous rappelons que dans ce système :

l'unité de longueur est le rayon de Bohr a_0 ^{☆)}

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \left(\frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{q^2} \text{ en S.I.} \right)$$

l'unité d'impulsion $p = \alpha mc$

(I-48)

et l'unité d'énergie $2 \text{ Rydberg} = \alpha^2 mc^2 = 2R_\infty$

Pour alléger les notations, nous noterons dorénavant les variables électroniques internes sous la forme \vec{r}_i, \vec{p}_i , la charge des électrons $e (< 0)$, la charge du noyau $(-Ze)$, le magnéton de Bohr $(\mu_B = \frac{e}{2m} < 0)$.

- l'interaction du champ magnétique avec le mouvement orbital des atomes se présente alors sous la forme :

$$\mathcal{H}_{\text{orb}} = -\mu_B \left(1 - \frac{m}{M}\right) \vec{H} \cdot \vec{L} + \frac{m}{M} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i \wedge \vec{p}_j) + \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i T_i \vec{l}_i \quad (\text{I-49})$$

expression dans laquelle \vec{L} représente le moment orbital total de l'atome.

Outre la correction de recul classique, il apparaît dans cette expression une correction de recul en $\frac{m}{M} \mu_B H$ introduite depuis fort longtemps par M. PHILLIPS ⁽¹⁴⁾ qui représente une correction au terme de corrélations électroniques $\frac{\vec{p}_{in} \cdot \vec{p}_{jn}}{m_n}$

et une correction en $\alpha^2 \mu_B H$ liée à la variation relativiste de masse (T_i représente l'énergie cinétique du $i^{\text{ème}}$ électron, et \vec{l}_i son moment cinétique).

Dans cette expression, comme dans tout ce qui suit, nous avons remplacé m/m_n par m/M où M représente la masse totale de l'atome; l'erreur ainsi

☆)

En fait, lorsqu'on s'intéresse aux corrections dues au recul du noyau, il peut y avoir intérêt à faire intervenir, plutôt que les variables usuelles définies ci-dessus, celles tenant compte de la masse réduite de l'électron, car comme on le voit sur (I-45), l'échelle de longueur de la fonction d'onde non perturbée est déterminée par μ et non par m ; toutefois dans les formules littérales, nous nous en tiendrons à l'échelle non modifiée qui met plus clairement en évidence l'origine des corrections de recul.

faite d'ordre $(\frac{m}{M})$ est inférieure à la précision espérée de notre calcul.

- la modification de l'interaction orbite-orbite sous l'action du champ extérieur :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{oo} = & + \frac{1}{2} \mu_B \alpha^2 \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \left\{ \frac{\vec{r}_i \wedge \vec{p}_j}{r_{ij}} - \frac{(\vec{r}_i \wedge \vec{r}_j)(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i)}{r_{ij}^3} \right\} \\ & - \frac{1}{2} \mu_B Z \alpha^2 \frac{m}{M} \vec{H} \cdot \sum_{i,k} \left\{ \frac{\vec{r}_k \wedge \vec{p}_i - \vec{r}_i \wedge \vec{p}_k}{r_i} + (\vec{r}_k \wedge \vec{r}_i) \frac{\vec{r}_i \cdot \vec{p}_i}{r_i^3} \right\} \end{aligned} \quad (I-50)$$

- l'interaction des spins avec le champ magnétique :

$$\mathcal{H}_{sp} = -g_s \mu_B \vec{S} \cdot \vec{H} + \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i 2\vec{s}_i \cdot \vec{r}_i + \frac{1}{2} (g_s - 2) \alpha^2 \mu_B \sum_i (\vec{s}_i \cdot \vec{p}_i)(\vec{p}_i \cdot \vec{H}) \quad (I-51)$$

Dans cette expression, g_s représente le moment anormal de l'électron (I-8), \vec{S} le spin total de l'atome.

- la modification de l'interaction spin-orbite sous l'action du champ extérieur :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{sp.o} = & -Z \frac{\alpha^2}{2} (g_s - 1) \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \vec{r}_i \wedge (\vec{s}_i \wedge \frac{\vec{r}_i}{r_i^3}) \\ & + \frac{\alpha^2}{2} (g_s - 1) \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \vec{r}_i \wedge (\vec{s}_i \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}) \\ & - \frac{\alpha^2}{2} g_s \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \vec{r}_j \wedge (\vec{s}_i \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}) \\ & + Z \frac{\alpha^2}{2} \frac{m}{M} g_s \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \vec{r}_k \wedge (\vec{s}_i \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}) \end{aligned} \quad (I-52)$$

expression dans laquelle on reconnaît les contributions provenant de l'interaction spin-orbite à proprement parler, de l'interaction spin-orbite mutuelle, et de l'interaction spin-autre orbite. Le quatrième terme est une correction de recul d'ordre $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$.

TABLEAU I-1

- opérateurs d'ordre $\alpha^2 \mu_B H$

$$h_1 = \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i T_i (\vec{L}_i + 2\vec{S}_i)$$

$$h_2 = -\frac{1}{2} Z \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \vec{r}_i \wedge (\vec{S}_i \wedge \frac{\vec{r}_i}{r_i^3})$$

$$h_3 = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \vec{r}_i \wedge \left\{ (\vec{S}_i + 2\vec{S}_j) \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \right\}$$

$$h_4 = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \left\{ \frac{\vec{r}_i \wedge \vec{p}_j}{r_{ij}} - \frac{(\vec{r}_i \wedge \vec{r}_j)(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i)}{r_{ij}^3} \right\}$$

- opérateur d'ordre $\frac{m}{M} \mu_B H$

$$h_5 = \frac{m}{M} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i \wedge \vec{p}_j)$$

- opérateurs d'ordre $\alpha^3 \mu_B H$

$$h_6 = \frac{\alpha^3}{2\pi} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \vec{p}_i (\vec{p}_i \cdot \vec{S}_i)$$

$$h_7 = -\frac{Z\alpha^3}{2\pi} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \vec{r}_i \wedge (\vec{S}_i \wedge \frac{\vec{r}_i}{r_i^3})$$

$$h_8 = \frac{\alpha^3}{2\pi} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i \neq j} \vec{r}_i \wedge \left\{ (\vec{S}_i + \vec{S}_j) \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \right\}$$

- opérateurs d'ordre $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$

$$h_9 = -\frac{Z\alpha^2}{2} \frac{m}{M} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{i,k} \left\{ \frac{\vec{r}_k \wedge \vec{p}_i - \vec{r}_i \wedge \vec{p}_k}{r_i} + (\vec{r}_k \wedge \vec{r}_i) \frac{\vec{r}_i \cdot \vec{p}_i}{r_i^3} \right\}$$

$$h_{10} = +Z\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B \vec{H} \cdot \sum_{\substack{i,j,k \\ i \neq j}} \vec{r}_k \wedge \left(\vec{S}_i \wedge \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \right)$$

- enfin le terme quadratique en champ :

$$\mathcal{H}_Q = \frac{\mu_B^2}{4R_\infty} \sum_i (\vec{H} \wedge \vec{r}_i)^2 + \frac{m}{M} \frac{\mu_B^2}{4R_\infty} \sum_{i,j} (\vec{H} \wedge \vec{r}_i) \cdot (\vec{H} \wedge \vec{r}_j) \quad (\text{I-53})$$

Regroupant les expressions (I-49), (I-50), (I-51), (I-52), (I-53), nous obtenons le hamiltonien d'interaction d'un atome à plusieurs électrons avec le champ magnétique externe jusqu'aux ordres $\alpha^3 \mu_B H$ et $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ inclus sous la forme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\ell + \mathcal{H}_Q$$

$$\mathcal{H}_\ell = g_L \mu_B \vec{L} \cdot \vec{H} + g_S \mu_B \vec{S} \cdot \vec{H} + \sum_i^{10} h_i \quad (\text{I-54})$$

avec :

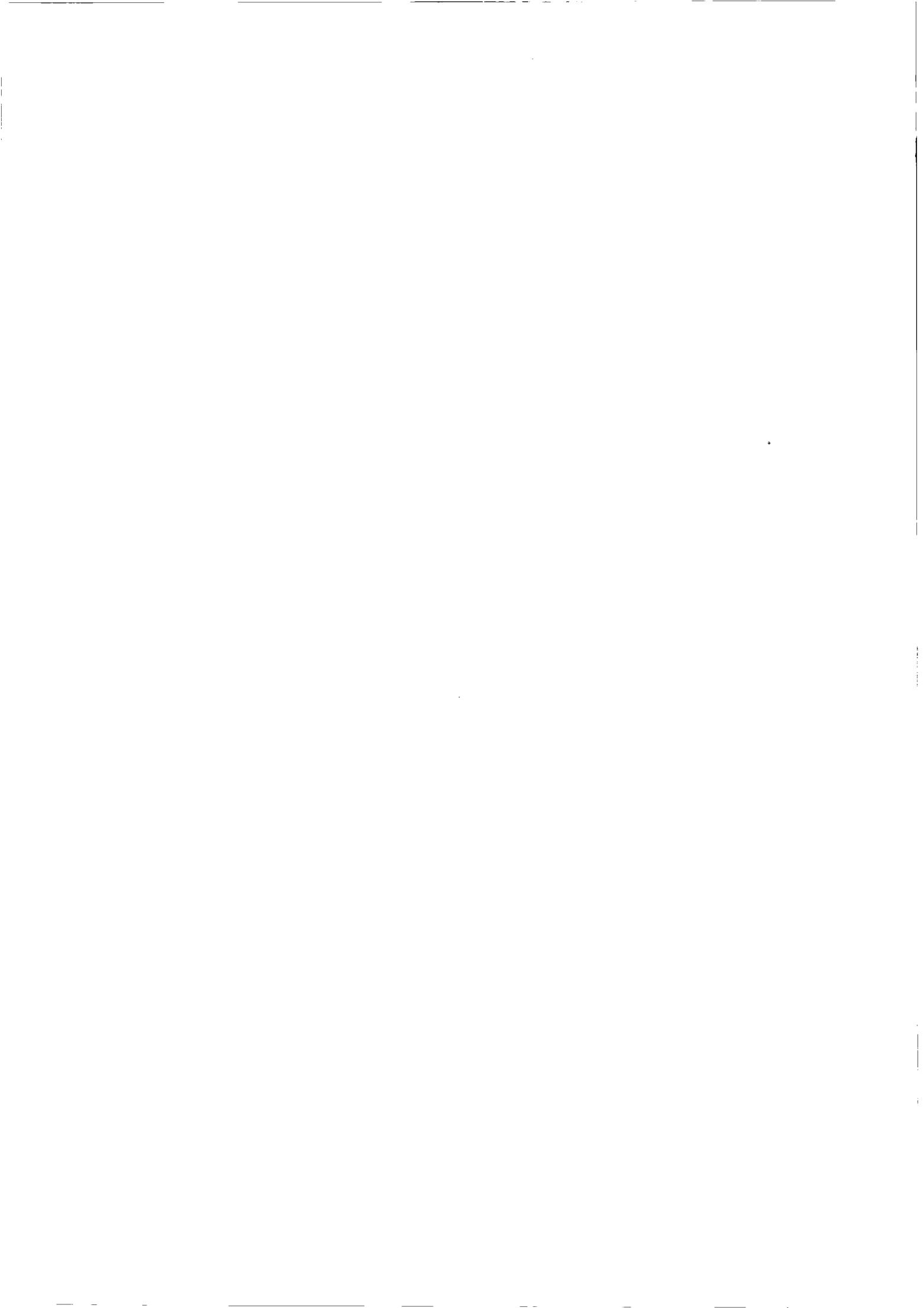
$$g_L = \left(1 - \frac{m}{M}\right) \quad m \text{ masse de l'électron, } M \text{ masse de l'atome}$$

g_S moment anormal de l'électron nu est donné par (I-8).

\mathcal{H}_ℓ rassemble les différents opérateurs linéaires en champ h_i qui sont regroupés en vue d'éventuelle utilisation numérique dans le tableau I.

Il est facile de vérifier que les termes obtenus à l'ordre $\frac{m}{M} \mu_B H$ et $\alpha^2 \mu_B H$ sont identiques à ceux obtenus précédemment par M. PHILLIPS (14) en ce qui concerne les corrections de recul et par ABRAGAM et VAN VLECK (12) et KAMBE et VAN VLECK (13) en ce qui concerne les corrections relativistes d'ordre $\alpha^2 \mu_B H$ (à ceci près que le hamiltonien de ces derniers auteurs n'est pas symétrique dans l'échange des électrons).

Les termes en $\alpha^3 \mu_B H$ dus à l'effet croisé des corrections radiatives et relativistes sont nouveaux, de même que les termes en $Z\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$ qui sont intimement liés aux corrélations électroniques.



CHAPITRE II

HAMILTONIEN D'UN ATOME A PLUSIEURS ELECTRONS DANS UN CHAMP MAGNETIQUE EXTERNE : POINT DE VUE CLASSIQUE

L'étude que nous venons de faire du hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons plongé dans un champ magnétique extérieur B_0 s'est achevée sur un certain nombre d'équations (I-44, I-45) dont la complexité semble interdire toute interprétation physique claire des phénomènes mis en jeu; l'introduction du moment anormal de l'électron s'est en particulier traduite par l'apparition, dans la forme non relativiste, de divers facteurs g , $g-1$, $g-2$ dont la signification reste particulièrement obscure. Il nous a donc paru intéressant d'essayer, par une démarche classique, d'éclairer l'origine des divers termes apparaissant dans le hamiltonien (I-44).

Une telle ambition nécessite l'introduction a priori du spin; c'est ce que nous faisons en attribuant aux diverses particules constitutives de l'atome un moment cinétique intrinsèque associé à un moment magnétique intrinsèque par un rapport gyromagnétique caractéristique de la nature de la particule envisagée (électron ou noyau éventuellement). Après ce postulat, la démarche qui conduit à l'équation du mouvement de l'atome se déroule entièrement dans le cadre de l'électromagnétisme classique.

En ce qui concerne les termes ne dépendant pas du spin, le problème ne présente aucune difficulté; il nécessite uniquement l'écriture convenable de l'interaction entre charges en mouvement et conduit directement au hamiltonien classique comprenant les termes d'énergie cinétique classiques et relativistes et les termes d'interaction bien connus : potentiel de Coulomb et interaction magnétique entre les orbites des diverses particules. Cette dérivation fait l'objet du paragraphe A.

L'équation du mouvement des spins est plus délicate à obtenir : le spin n'a une définition "intrinsèque" que dans les référentiels de repos de la particule à laquelle il est attaché. Or la particule étant accélérée, il en résulte que l'évolution du spin dans son référentiel de repos est conditionnée non seulement par les couples extérieurs qui agissent sur lui, mais également par un "couple d'entraînement" lié à la cinématique du référentiel. En l'absence de toute autre cause extérieure, ce couple est responsable d'une précession qui n'est autre que la précession de Thomas.

L'évaluation du couple externe et du couple d'entraînement permet d'écrire l'évolution du spin de la particule i dans les référentiels où elle est au repos; il suffit alors d'effectuer un changement de repère pour obtenir son évolution dans le référentiel du laboratoire et pouvoir ainsi reconstituer le hamiltonien total de l'atome. Nous consacrons le paragraphe B à l'étude formelle de la précession de Thomas, de l'expression du couple d'entraînement correspondant, et des problèmes de changement de repère.

Il suffit alors, en C, d'évaluer les divers champs électromagnétiques agissant sur les charges et les spins pour obtenir le hamiltonien total de l'atome. Il apparaît ainsi qu'au terme de "Zitterbewegung" près, le hamiltonien obtenu par la démarche classique coïncide exactement avec le hamiltonien déduit de l'équation de Breit généralisée (et ceci jusqu'à l'ordre $1/c^3$ inclus). De plus, comme nous le verrons alors, la classification en termes dont l'origine est l'interaction directe du spin avec le champ électromagnétique externe et en termes d'origine cinématique (précession de Thomas) éclaire totalement l'apparition du moment anormal dans les divers termes usuels. Nous concluons le paragraphe C par l'examen de chacun des termes du hamiltonien et la discussion de leur origine physique.

A. Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons sans spin

Dans ce paragraphe, nous établissons très rapidement à l'ordre $1/c^3$ le hamiltonien d'un atome formé d'un noyau et d'électrons sans spin. Cette partie s'inspire très largement d'idées et de calculs développés dans les livres de LANDAU (³¹) (Théorie du champ) et de GROOT et SUTTORP (³²) (Foundations of electrodynamics) et nous n'en rapporterons que le principe.

Le problème de l'écriture du hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons plongé dans un champ magnétique externe B_0 peut se décomposer en trois étapes :

- a) la recherche du hamiltonien d'une particule relativiste dans un champ électromagnétique quelconque décrit par le couple de potentiels (A, ϕ)
- b) l'expression des potentiels appropriés au cas particulier où chaque particule constituante de l'atome est soumise non seulement au champ magnétique externe, mais encore aux champs électriques et magnétiques créés par les autres particules chargées en mouvement
- c) et enfin l'écriture du hamiltonien total comme somme des hamiltoniens à une particule (à l'ordre de perturbation où nous travaillons ($1/c^3$ ou encore $\alpha^5 mc^2$), cette hypothèse est totalement justifiée; elle ne le serait plus à l'ordre supérieur).

a.) Hamiltonien d'une particule sans spin dans un champ électromagnétique

Cette première étape du développement est classique et ne présente aucune difficulté (voir par exemple LANDAU ⁽³¹⁾, page 59); on trouve la fonction de Hamilton de la particule i sous la forme :

$$\mathcal{H}_i = \sqrt{m_i^2 c^4 + c^2 (\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i)^2} + e_i \phi_i \quad (\text{II-1})$$

où m_i représente la masse au repos, \vec{p}_i l'impulsion, et e_i la charge de la particule i soumise au champ électromagnétique dérivant des potentiels (A_i, ϕ_i) .

Le développement en puissance inverse de c conduit à la forme usuelle :

$$\mathcal{H}_i = m_i c^2 + \frac{(\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i)^2}{2m_i} - \frac{1}{8} \frac{(\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i)^4}{m_i^3 c^2} + e_i \phi_i \quad (\text{II-2})$$

Pour expliciter ce hamiltonien, il nous faut maintenant déterminer les potentiels \vec{A}_i et ϕ_i qui décrivent l'action sur la particule i du champ extérieur \vec{B}_0 et du champ de l'ensemble des autres particules j en mouvement ($j \neq i$).

b.) Expression des potentiels et des champs retardés créés par une particule en mouvement

L'expression des potentiels nécessite le choix d'une jauge; nous prendrons le choix usuel qui est celui de la jauge de Coulomb :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (\text{II-3})$$

Ses avantages en sont bien connus : elle permet de séparer la partie longitudinale du champ (interaction électrostatique instantanée) qui est la partie la plus importante de la partie transverse plus petite. Son inconvénient majeur réside dans le fait que la condition (II-3) n'est pas invariante relativiste.

A l'instant t , nous développons alors, en puissance de $1/c$, les potentiels et les champs exprimés en fonction des variables dynamiques des différentes particules à ce même instant (suivant la méthode due à de GROOT et SUTTORP (³³)). Les résultats de ce développement sont donnés dans le tableau (II-1) où nous avons utilisé, comme dans tout ce qui suit, le système électrostatique non rationalisé où :

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1 \quad \text{et} \quad \frac{\mu_0}{4\pi} = \frac{1}{c^2} \quad (\text{II-4})$$

Ce système a, pour notre étude, l'avantage de permettre une classification très facile, suivant les puissances de $1/c$, des potentiels, des champs et des interactions auxquelles ils donnent lieu.

Nous insistons sur le fait que toutes les quantités utilisées dans le tableau II-1 doivent être exprimées à l'instant t où l'on mesure l'effet du champ créé, la formulation tenant explicitement compte des effets de retard. Le potentiel scalaire, comme il se doit, se réduit au seul terme électrostatique instantané.

Nous avons donné l'expression du potentiel vecteur jusqu'au terme en $1/c^3$ inclus. Le terme $\vec{A}_i^{(3)}$ donne naissance aux forces de freinage de rayonnement (voir réf. (³¹), page 258). Il est bien connu en électromagnétisme classique que ce terme conduit à des difficultés dans la mesure où il donne naissance à une dissipation d'énergie par le système atomique. Un tel processus ne peut

TABLEAU II-1

 EXPRESSION DES POTENTIELS ET DES CHAMPS CRÉÉS AU POINT 1 PAR UNE PARTICULE j EN MOUVEMENT

Potentials dans la jauge de Coulomb (en unités électrostatiques non rationalisées)

$$\phi_1 \equiv \phi_1^{(0)} \equiv \frac{e_j}{r_{1j}}$$

$$\vec{A}_1 = \sum_n \vec{A}_1^{(n)}$$

avec

$$\vec{A}_1^{(0)} = \vec{A}_1^{(1)} = 0$$

$$\vec{A}_1^{(2)} = \frac{e_j}{2c} \frac{\vec{\beta}_j + \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\beta}_j)}{r_{1j}} \quad \text{avec} \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}_{1j}}{r_{1j}}, \quad \vec{\beta}_j = \frac{\vec{v}_j}{c}$$

$$\vec{A}_1^{(3)} = -\frac{2e_j}{3c^2} \dot{\vec{\beta}}_j$$

Champs

$$\vec{E}_1 = \sum_n \vec{E}_1^{(n)}$$

$$\vec{E}_1^{(0)} = e_j \frac{\vec{n}}{r_{1j}^2}$$

$$\vec{E}_1^{(1)} = 0$$

$$\vec{E}_1^{(2)} = \frac{e_j}{2} \frac{\vec{n}}{r_{1j}^2} \left[\beta_j^2 - 3(\vec{n} \cdot \vec{\beta}_j)^2 \right] - \frac{e_j}{2r_{1j}c} \left[\dot{\vec{\beta}}_j + \vec{n}(\vec{n} \cdot \dot{\vec{\beta}}_j) \right]$$

$$\vec{E}_1^{(3)} = \frac{2e_j}{3} \frac{\ddot{\vec{\beta}}_j}{c^2}$$

$$\vec{B}_1 = \sum_n \vec{B}_1^{(n)}$$

$$\vec{B}_1^{(0)} = \vec{B}_1^{(1)} = 0$$

$$\vec{B}_1^{(2)} = \frac{e_j}{r_{1j}^2} \frac{\vec{\beta}_j \wedge \vec{n}}{c}$$

$$\vec{B}_1^{(3)} = 0$$

évidemment être étudié de façon cohérente qu'en quantifiant le champ électromagnétique. Il ne peut être question, dans le cadre de ce travail, d'essayer de retrouver classiquement de tels effets radiatifs, et nous ne tiendrons donc pas compte de ce terme.

c. Hamiltonien d'une particule sans spin

Munis de l'expression des potentiels créés par les particules en mouvement (tableau II-1), nous pouvons alors expliciter la forme du hamiltonien régissant le mouvement d'une particule i , en interaction avec un champ magnétique externe \vec{B}_0 et des particules j en mouvement.

Toutes réductions faites, à l'ordre $1/c^2$ inclus, le hamiltonien (II-2) se met, compte tenu des résultats du tableau II-1, sous la forme :

$$\mathcal{H}_i = m_i c^2 + \frac{\pi_i^2}{2m_i} - \frac{1}{8} \frac{\pi_i^4}{m_i^3 c^2} + \sum_{j \neq i} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} - \sum_{j < i} \frac{e_i e_j}{2m_i m_j c^2} \frac{\vec{\pi}_i \cdot (\vec{\pi}_j + \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\pi}_j))}{r_{ij}} \quad (\text{II-5})$$

la quantité de mouvement $\vec{\pi}_i$ étant reliée à l'impulsion et au champ magnétique externe par les relations :

$$\vec{\pi}_i = \vec{p}_i - e_i \vec{A}_0(\vec{r}_i) \quad (\text{II-6})$$

$$\text{avec} \quad \vec{A}_0(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} (\vec{B}_0 \wedge \vec{r}_i)$$

Nous reconnaissons, dans l'expression (II-5), le hamiltonien de Darwin (³⁴). Outre la correction d'énergie cinétique relativiste, ce hamiltonien comporte une correction à l'interaction électrostatique instantanée dont on rend compte usuellement en termes d'interaction magnétique entre les orbites des particules en mouvement. Remarquons enfin qu'aux termes de freinage près, ce hamiltonien reste valable jusqu'à l'ordre $1/c^3$ inclus.

Nous obtenons enfin le hamiltonien total comme la somme des hamiltoniens à une particule en prenant soin de ne compter qu'une fois les termes croisés. Ayant ainsi rappelé ces résultats classiques, nous allons les compléter par l'étude du problème des particules douées de spin.

B. Equations du mouvement du spin. Formulation hamiltonienne

a.) Moments cinétiques et magnétiques intrinsèques

Dans un point de vue classique, nous décrivons une particule i douée de spin, en lui attribuant un moment cinétique intrinsèque \vec{S}_i et un moment magnétique $\vec{\mu}_i$ liés par la relation :

$$\vec{\mu}_i = g_i \mu_{oi} \vec{S}_i \quad (\text{II-7})$$

avec

$$\mu_{oi} = \frac{e_i}{2m_i}$$

Plusieurs remarques s'imposent :

1°) La relation (II-7) est une relation entre vecteurs purement spatiaux, ce qui ne définit pas complètement le caractère 4-tensoriel du spin. En fait deux choix sont possibles : 4-vecteur ou 4-tenseur antisymétrique. Les deux points de vue ont effectivement été adoptés : le premier par HAGEDORN (³⁵), BARGMAN, MICHEL et TELEGGI (³⁶), le second par de GROOT (³¹). Ce second point de vue est d'une signification physique plus claire lorsqu'on étudie l'interaction du spin avec des champs extérieurs; c'est donc celui que nous adopterons ici :

Nous considérerons le moment cinétique intrinsèque de la particule i comme un 4-tenseur antisymétrique Σ dont la partie purement spatiale dans un référentiel de repos de la particule est égale à \vec{S}_i , la partie spatio-temporelle étant alors nulle.

La classe de référentiels où la particule est au repos joue un rôle privilégié : c'est la seule classe de référentiels où le spin possède les propriétés intrinsèques que la mécanique quantique attribue à l'opérateur $\vec{\sigma}$, à savoir caractère spatial, longueur constante ...

2°) Dans un référentiel d'inertie quelconque F dans lequel la particule est animée de la vitesse $c\vec{\beta}$, le quadri-tenseur Σ ainsi défini possède une composante spatio-temporelle non nulle qui n'est autre (au facteur $-\gamma$ près) que le moment dipolaire électrique associé au moment magnétique en mouvement. On obtient aisément l'expression des composantes $(-c\vec{\mathcal{D}}, \vec{\mathcal{J}})$ de Σ dans le référentiel F , en fonction de celles $(0, \vec{S})$ dans le référentiel propre par utilisation des formules de transformation de Lorentz des tenseurs antisymétriques (cf. Appendice I). Il vient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{S} = \gamma \vec{\Omega} \vec{S} \\ \vec{D} = \frac{1}{c} \gamma \vec{\beta} \wedge \vec{S} = \frac{1}{c} \vec{\beta} \wedge \vec{D} \end{array} \right. \quad (\text{II-8})$$

expressions dans lesquelles :

$$\vec{\beta} = \frac{\vec{v}}{c} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (\text{II-9})$$

$\vec{\Omega}$ est le tenseur contraction de Lorentz défini par :

$$\vec{\Omega} = \vec{U} - \frac{\gamma}{\gamma + 1} \vec{\beta} \vec{\beta} \quad (\text{II-10})$$

(expression dans laquelle \vec{U} représente le tenseur unité, $\vec{\beta} \vec{\beta}$ le tenseur de projection sur $\vec{\beta}$. Les formules de passage de la transformation de Lorentz et les propriétés utiles du tenseur $\vec{\Omega}$ sont rappelées dans l'Appendice I).

En possession d'une bonne définition covariante du spin dans le référentiel de repos de la particule, nous pouvons aborder le problème de sa loi d'évolution. Malheureusement la particule étant accélérée, son référentiel de repos n'est pas un référentiel d'inertie, et les lois de la dynamique dans un référentiel non inertiel ne sont pas les lois usuelles de la relativité restreinte.

En mécanique classique, le problème de la dynamique d'un point matériel d'un référentiel accéléré est résolu en ajoutant aux forces d'origine externe des forces dites "d'entraînement" (force centrifuge, force de Coriolis) qui sont des forces d'origine purement cinématique. Notre but est le même ici, il consiste à trouver le ou les couples d'origine cinématique agissant sur le spin attaché à une particule accélérée. En fait, ce problème n'a rien de nouveau, les premiers résultats sur ce sujet ayant été publiés en 1926 par THOMAS.

b.) Equation du mouvement du spin dans un référentiel accéléré.

Précession de Thomas

Le problème de la précession de Thomas est un problème de cinématique dont la seule difficulté consiste en une définition méticuleuse des repères d'inertie dans lesquels on travaille.

Nous supposons le laboratoire doté d'un référentiel d'inertie L_0 .

Nous introduisons alors une classe de référentiels d'inertie $R(t)$ définis comme suit :

A l'instant t_0 le référentiel $R(t_0)$ est le référentiel tangent au mouvement de la particule d'axes parallèles à L_0 . C'est un référentiel d'inertie animé par rapport à L_0 de la vitesse $\vec{v}_0 = \vec{v}(t_0)$ (vitesse instantanée de la particule) dans lequel la particule est momentanément au repos (elle ne l'est qu'à $t = t_0$). Cette suite de référentiels présente deux avantages :

- ce sont des référentiels instantanés de repos
- on passe directement par une transformation de Lorentz spéciale de la description d'une grandeur de $R(t)$ à sa description dans L_0

Pendant le produit de deux transformations de Lorentz spéciales de vitesses non colinéaires n'étant pas une transformation de Lorentz spéciale, les référentiels $R(t)$ ne sont pas parallèles entre eux et par suite, en dehors de toute autre cause physique, le moment cinétique, comme toutes les grandeurs intrinsèques de l'atome, évolue dans la suite de référentiels $R(t)$. C'est cette évolution que nous nous proposons de calculer.

Dans la mesure où nous avons défini le spin comme la partie spatiale d'un 4-tenseur antisymétrique, nous ferons notre démonstration pour un 4-tenseur.

1°) Repérant le spin dans la succession des référentiels de repos de la particule $R(t)$, nous pouvons définir une fonction vectorielle $\vec{S}(t)$ qui, à chaque instant t , mesure la composante spatiale du spin dans le référentiel instantané de repos $R(t)$. La connaissance de la dynamique de $R(t)$ et de celle de $\vec{S}(t)$ dans $R(t)$ détermine entièrement le comportement du spin. La cohérence de notre définition du moment cinétique intrinsèque (§ B-a) implique que la fonction vectorielle $-c\vec{P}(t)$ associée à la partie spatio-temporelle du 4-tenseur antisymétrique est identiquement nulle dans $R(t)$ au temps t .

2°) A l'instant $t = t_a$, correspond un repère d'inertie $R(t_a)$ où la particule est momentanément au repos. Soit $c\vec{\beta}_a(t)$ la vitesse de la particule repérée à l'instant t , dans le référentiel $R(t_a)$; on a par définition :

$$c\vec{\beta}_a(t_a) = 0 \quad (\text{II-11})$$

(Dans tout ce qui suit, nous indiquerons d'un indice a toutes les grandeurs repérées dans $R(t_a)$).

Pour évaluer la vitesse d'évolution du spin dans $R(t)$, nous écrivons, à un instant t quelconque (postérieur à t_a), la relation existant entre $S(t)$ composante spatiale du spin dans $R(t)$ (unique composante non nulle dans ce repère) et ses composantes $\{ -c \vec{\mathcal{G}}_a(t), \vec{\mathcal{J}}_a(t) \}$ dans $R(t_a)$. Soit $\Lambda [\vec{\beta}(t)]$ la transformation de Lorentz faisant passer des composantes d'un tenseur antisymétrique repérées dans le référentiel d'inertie L_0 aux composantes dans le référentiel $R(t)$ animé par rapport à L_0 de la vitesse $c\vec{\beta}(t)$

$$\{ 0, S(t) \} = \Lambda [\vec{\beta}(t)] \Lambda^{-1} [\vec{\beta}(t_a)] \{ -c \vec{\mathcal{G}}_a(t), \vec{\mathcal{J}}_a(t) \} \quad (\text{II-12})$$

☆)

On voit distinctement sur cette forme les deux causes d'évolution du spin.

- le terme $\{ -c \vec{\mathcal{G}}_a(t), \vec{\mathcal{J}}_a(t) \}$ prend en compte son évolution propre liée aux champs externes agissant dans le référentiel fixe $R(t_a)$
- la contribution du produit des transformations de Lorentz met en évidence l'évolution du repère dans lequel on mesure $S(t)$ par rapport au repère fixe $R(t_a)$.

Compte tenu des relations (II-8) et des propriétés de la transformation de Lorentz explicitées dans l'appendice I, l'équation (II-12) se réduit à :

$$\begin{cases} \vec{S}(t) = \gamma^{-1}(t) \vec{\Omega}^{-1}(t) \gamma(t_a) [\vec{\Omega}(t_a) \vec{\mathcal{J}}_a(t) + \vec{\beta}(t_a) \wedge (\vec{\beta}_a(t) \wedge \vec{\mathcal{J}}_a(t))] \\ \vec{P}(t) \equiv 0 \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

A ce point de la démonstration, nous insistons sur le fait que la condition $\vec{P}(t) \equiv 0$ est l'hypothèse fondamentale de ce calcul.

Une démonstration analogue de la précession de Thomas peut être effectuée pour toute grandeur purement spatiale de $R(t)$.

En dérivant alors l'expression (II-13) par rapport au temps t , et en prenant la dérivée à l'instant $t = t_a$, il vient alors, compte tenu de (II-11) :

$$\left[\frac{d\vec{S}(t)}{dt} \right]_{t=t_a} = \left[\frac{d}{dt} \vec{\mathcal{J}}_a(t) \right]_{t=t_a} + \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \left[\frac{d\vec{\beta}}{dt} \wedge \vec{\beta} \right]_{t=t_a} \wedge \vec{S}(t_a) \quad (\text{II-14})$$

Cette équation nous montre que la vitesse d'évolution du spin dans la succession des repères $R(t)$ est la somme de la vitesse d'évolution liée aux actions externes, mesurée à l'instant t dans le référentiel $R(t)$ plus une "vitesse d'entraînement" qui n'est autre que la précession de Thomas de vitesse angulaire :

☆) à $t = t_a$, nous avons bien $\vec{S}(t_a) = \vec{\mathcal{J}}_a(t_a)$ et $\vec{\mathcal{G}}_a(t_a) = 0$

$$\vec{\omega}_T = \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \frac{d\vec{\beta}}{dt} \wedge \vec{\beta} \quad (\text{II-15})$$

Remarques: 1°) On peut développer une démonstration extrêmement voisine pour un 4-vecteur de composante temporelle nulle; la conclusion est identique, ce qui est tout à fait cohérent avec l'image géométrique que nous donnions dans l'introduction de ce paragraphe de la rotation des repères $R(t)$ les uns par rapport aux autres.

2°) Cette équation fait intervenir les dérivées par rapport au temps du laboratoire, ce qui masque le caractère covariant de l'équation (II-14). En fait, l'utilisation du temps du laboratoire dans ce problème doit être considérée comme un choix particulier de paramétrage de la ligne d'univers de la particule. Un autre choix consiste à utiliser le temps propre τ de la particule, ce qui restitue à l'équation du mouvement un caractère covariant plus clair

$$\left[\frac{d\vec{S}}{d\tau} \right]_{\tau=\tau_a} = \left[\frac{d\vec{S}_A}{d\tau} \right]_{\tau=\tau_a} + \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \left[\frac{d\vec{\beta}}{d\tau} \wedge \vec{\beta} \right] \wedge \vec{S}(\tau_A) \quad (\text{II-16})$$

c.) Formulation hamiltonienne de l'équation du mouvement du spin

L'équation (II-16) est une équation du mouvement du spin dans $R(t)$.

Notre but est maintenant de trouver un hamiltonien gouvernant ce mouvement.

Plusieurs problèmes se posent alors :

- α) une formulation hamiltonienne classique nécessite la définition de couples de variables conjuguées, or nous n'avons pas jusqu'ici défini de variables conjuguées du spin
- β) l'équation du mouvement écrite en (II-16) est une équation écrite dans le référentiel $R(t)$. Mais en dernier ressort, ce qui nous intéresse c'est un hamiltonien gouvernant le mouvement de la particule i dans le référentiel du laboratoire de façon à pouvoir régler le problème du mouvement d'ensemble en repérant chaque particule composant l'atome dans le même référentiel.

Des éléments de réponse à ces deux problèmes ont été proposés de manière extrêmement générale par BARUT ⁽³⁸⁾ qui démontre

- qu'il est possible de définir formellement soit en formalisme Lagrangien, soit en formalisme hamiltonien des variables conjuguées

pour décrire les équations du mouvement du spin, qu'il est possible de faire un choix de Lagrangien ou de hamiltonien permettant l'écriture d'équations du mouvement sous une forme totalement covariante. Le hamiltonien a alors la particularité d'être un scalaire, ce qui permet de résoudre aisément les problèmes du formalisme des crochets de Poisson et des changements de repère.

Le problème nous semble donc soluble de façon totalement cohérente du point de vue classique, mais il nécessite un formalisme covariant très élaboré qui sortirait du cadre de ce travail; nous nous contenterons d'un formalisme des crochets de Poisson adapté, beaucoup plus élémentaire et qui nous suffira pour traiter le problème simple qui nous préoccupe à savoir la dérivation de l'équation (II-16) d'un hamiltonien.

(1) Equation du mouvement et hamiltonien dans R(t)

Il suffit en effet de définir formellement dans R(t) le crochet de Poisson des composantes k et l du spin i, par :

$$\{ S_k, S_l \} = \epsilon_{klm} S_m \quad (\text{II-17})$$

où ϵ_{klm} représente le tenseur totalement antisymétrique de LEVI-CIVITA et de postuler que le spin de l'électron i commute avec la position et l'impulsion de l'électron i (c.à.d $\{ \vec{S}_i, \vec{p}_i \} = 0, \{ \vec{S}_i, \vec{r}_i \} = 0$) et avec toutes les grandeurs physiques caractérisant les autres particules j.

On passe ainsi sans difficulté de l'équation usuelle donnant, dans R(t), l'évolution relative du spin due à la présence d'un champ magnétique externe B_R (mesuré dans R(t))

$$\left(\frac{d\vec{S}}{d\tau} \right)_{\text{rel}} = g\mu_B \vec{S} \wedge \vec{B}_R \quad (\text{II-18})$$

au hamiltonien gouvernant ce mouvement sous la forme :

$$\mathcal{H}_R = -g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}_R \quad (\text{II-19})$$

On vérifie très aisément que ce hamiltonien (II-19) redonne immédiatement (II-18) par utilisation de l'équation usuelle :

$$\frac{d\vec{S}}{d\tau} = \{ \vec{S}, \mathcal{H}_R \} + \frac{\partial \vec{S}}{\partial \tau} \quad (\text{II-20})$$

(dans ce cas, l'opérateur $\vec{S}(t)$ ne dépend pas explicitement du temps et $\frac{\partial \vec{S}}{\partial \tau} = 0$).

De la même façon, le couple de la précession de Thomas peut être considéré comme équivalent à l'action d'un champ magnétique B_T :

$$\vec{B}_T = -\gamma \frac{\vec{\omega}_T}{g \mu_B} \quad (\text{II-21})$$

et l'équation (II-16) se met alors sous la forme :

$$\frac{d\vec{S}}{d\tau} = \{ \vec{S}, \mathcal{H}_R^{\text{TOT}} \} \quad (\text{II-22})$$

avec :

$$\mathcal{H}_R^{\text{TOT}} = -g\mu_B \vec{S} \cdot (\vec{B}_R + \vec{B}_T) = -g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}_R + \gamma \vec{\omega}_T \cdot \vec{S} \quad (\text{II-23})$$

(2) Equations du mouvement et hamiltonien dans le laboratoire

Comme nous l'indiquons dans l'introduction de ce paragraphe (remarque β), la solution définitive de notre problème nécessite la connaissance du hamiltonien de chaque particule i constituante de l'atome, dans un référentiel commun; dans la logique du chapitre précédent, ce référentiel privilégié est, bien entendu, celui du laboratoire.

Nous sommes donc maintenant confrontés à un problème de changement de repère : passage du référentiel $R(t)$ au référentiel du laboratoire L_0 . Dérivons les équations (II-8) qui donnent la composante du spin dans le laboratoire en fonction de celles dans le référentiel propre; il vient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{\mathcal{S}}}{dt} = \left(\frac{d}{dt} \gamma \vec{\Omega} \right) \vec{S} + \gamma \vec{\Omega} \frac{d\vec{S}}{dt} \\ \frac{d\vec{\mathcal{P}}}{dt} = \frac{1}{c} \left(\frac{d}{dt} \gamma \vec{\beta} \right) \vec{S} + \frac{\gamma}{c} \vec{\beta} \wedge \frac{d\vec{S}}{dt} \end{array} \right. \quad (\text{II-24})$$

Le premier terme de chacune des deux équations représente la vitesse d'évolution de $\vec{\mathcal{S}}$ et $\vec{\mathcal{P}}$ due à la variation de la transformation de Lorentz qui fait passer du référentiel propre de la particule au référentiel du laboratoire; du fait du mouvement non uniforme de la particule, cette transformation dépend explicitement du temps; ces termes sont donc les dérivées partielles de $\vec{\mathcal{S}}$ et $\vec{\mathcal{P}}$ par rapport

au temps. Le deuxième terme (à un facteur γ près) représente la transformée dans le changement de base de la vitesse d'évolution de \vec{S} ; compte tenu de (II-21), (II-24) peut se réécrire sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{\partial\vec{S}}{\partial t} + \vec{\omega} \wedge \{ \vec{S}, \mathcal{H}_R^{\text{TOT}} \} \\ \frac{d\vec{\mathcal{P}}}{dt} = \frac{\partial\vec{\mathcal{P}}}{\partial t} + \frac{\vec{\beta}}{c} \wedge \{ \vec{S}, \mathcal{H}_R^{\text{TOT}} \} \end{array} \right. \quad (\text{II-25})$$

L'utilisation des règles de commutation (II-17) permet de réécrire (II-25) sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{\partial\vec{S}}{\partial t} + \{ \vec{S}, \frac{1}{\gamma} \mathcal{H}_R^{\text{TOT}} \} \\ \frac{d\vec{\mathcal{P}}}{dt} = \frac{\partial\vec{\mathcal{P}}}{\partial t} + \{ \vec{\mathcal{P}}, \frac{1}{\gamma} \mathcal{H}_R^{\text{TOT}} \} \end{array} \right. \quad (\text{II-26})$$

ce qui prouve que le hamiltonien gouvernant l'équation du mouvement dans le laboratoire est le hamiltonien :

$$\mathcal{H}_{\text{lab}} = - \frac{1}{\gamma} g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}_R + \vec{\omega}_T \cdot \vec{S} \quad (\text{II-27})$$

Remarques importantes :

1°) Nous conservons dans l'expression (II-27) l'expression des composantes du spin dans le référentiel $R(t)$, car ce sont les grandeurs intrinsèques dont les règles de commutation sont simples. Il faut d'ailleurs noter que la même attitude est adoptée en mécanique quantique. On retrouve d'ailleurs en mécanique quantique, dans le point de vue de BLOUNT (³⁷), des équations en tous points identiques aux équations (II-26) (voir également réf. (³²), chap. VIII).

2°) Si l'on néglige le problème des équations du mouvement, le passage du hamiltonien (II-23) dans $R(t)$ au hamiltonien (II-27) dans le référentiel du laboratoire peut se faire encore plus simplement par la constatation que l'expression (II-23) est un scalaire (au sens 4-tensoriel du terme) et par suite invariant dans une transformation de Lorentz. Le facteur $1/\gamma$ qui s'introduit entre (II-23) et (II-27) traduit simplement le changement d'échelle de temps (passage du temps propre au temps du laboratoire).

3°) Nous aurons, dans tout ce qui suit, l'occasion de distinguer les deux parties du hamiltonien (II-27); nous réserverons au premier terme le qualificatif de purement magnétique (\mathcal{H}_{mag}) parce qu'il traduit l'interaction du moment magnétique avec les divers champs; nous utiliserons le qualificatif de cinématique pour le second qui traduit l'effet de la précession de Thomas (\mathcal{H}_T).

A ce point, il peut être intéressant de réécrire le hamiltonien magnétique en fonction des composantes du champ électromagnétique dans le laboratoire (notées \vec{E}_L , \vec{B}_L); il vient alors :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{mag}} &= -\frac{1}{\gamma} g\mu_B (\vec{S} \cdot \vec{B}_R) \\ &= -\frac{1}{\gamma} g\mu_B (\vec{S} \cdot \vec{B}_L + \vec{S} \cdot \vec{E}_L)\end{aligned}\quad (\text{II-28})$$

Cette dernière forme ne fait intervenir que les composantes des grandeurs dans le référentiel du laboratoire; elle est physiquement intéressante puisqu'elle traduit l'interaction, dans le référentiel du laboratoire, du moment dipolaire magnétique avec le champ magnétique et celle du moment dipolaire électrique avec le champ électrique; mais en fait, dans les calculs, nous utiliserons plutôt la forme développée ci-dessous qui fait intervenir explicitement les composantes du spin dans le référentiel propre :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}_{\text{Lab}} = \mathcal{H}_{\text{mag}} + \mathcal{H}_{\text{Th}} \\ \mathcal{H}_{\text{mag}} = -g\mu_B \left[\vec{B}_L \cdot \vec{\Omega} \vec{S} + \vec{E}_L \cdot \frac{(\vec{\beta} \wedge \vec{S})}{c} \right] \\ \mathcal{H}_{\text{Th}} = \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \left(\frac{d\vec{\beta}}{dt} \wedge \vec{\beta} \right) \cdot \vec{S} \end{array} \right. \quad (\text{II-29})$$

Formellement, le problème du hamiltonien de particules avec spin est donc résolu; il ne reste plus qu'à expliciter les divers champs dus aux charges et aux moments magnétiques en mouvement pour avoir l'expression du hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons. Le développement des champs dus aux charges en mouvement a déjà été reporté dans le tableau II-1. Nous rapportons dans l'appendice II la méthode utilisée pour calculer les champs créés par les moments magnétiques en mouvement.

C. Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons dans un champ magnétique externe

Pour obtenir le hamiltonien d'interaction de la particule i avec le champ magnétique externe \vec{B}_0 et avec les autres particules j , nous expliciterons successivement les termes $\mathcal{H}_{\text{mag}}^i$ et $\mathcal{H}_{\text{Th}}^i$ de l'équation (II-29).

a.) Calcul du hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{mag}}^i$

Nous regroupons les résultats du tableau II-1 (champs créés par une charge en mouvement) et de l'appendice II (champs créés par une distribution de polarisation) en ne conservant que les termes conduisant à des interactions d'ordre inférieur ou égal à $1/c^3$; il vient :

$$\mathcal{H}_{\text{mag}}^i = -g_i \mu_{oi} \left[\vec{B}_i \cdot \left(1 - \frac{\vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_i}{2m_i^2 c^2} \right) \vec{S}_i + \vec{E}_i \cdot \frac{\vec{\pi}_i \wedge \vec{S}_i}{m_i c^2} \right] \quad (\text{II-30})$$

avec :

$$\vec{B}_i = \vec{B}_0 + \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_j c^2} \frac{\vec{\pi}_j \wedge \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} + \frac{1}{c^2} \sum_{j \neq i} g_j \mu_{oj} \left\{ \frac{3(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^5} - \frac{\vec{S}_j}{r_{ij}^3} \right\}$$

$$\vec{E}_i = \sum_{j \neq i} e_j \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}$$

soit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{mag}}^i &= -g_i \mu_{oi} \vec{S}_i \left(1 - \frac{\vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_i}{2m_i^2 c^2} \right) \cdot \vec{B}_0 & \text{(II-31)} \\ &- g_i \mu_{oi} \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_j c^2} \vec{S}_i \cdot \frac{\vec{\pi}_i \wedge \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} - g_i \mu_{oi} \sum_{j \neq i} e_j \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \cdot \left(\frac{\vec{\pi}_i \wedge \vec{S}_i}{m_i c^2} \right) \\ &- g_i \mu_{oi} \sum_{j \neq i} \frac{g_j \mu_{oj}}{c^2} \left\{ 3 \frac{(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \frac{\vec{S}_j \cdot \vec{S}_i}{r_{ij}^3} \right\} \end{aligned}$$

A ce stade, l'origine physique des divers termes qui apparaissent est très claire, on reconnaît successivement l'interaction du moment magnétique avec le champ magnétique externe (vu dans son repère), l'interaction du moment magnétique avec le champ créé par les charges j en mouvement (BIOT et SAVART), puis l'interaction du moment dipolaire électrique induit de la particule i en mouvement avec le champ électrique des particules j ^(★), et enfin l'interaction entre les moments magnétiques ^(★★).

b.) Calcul du hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{Th}}^i$

Le calcul du hamiltonien de la précession de Thomas nécessite celui de l'accélération de la particule i .

Or l'équation du mouvement de la particule i dans le référentiel du laboratoire s'écrit :

$$\frac{d\vec{\pi}_i}{dt} = e_i (\vec{E}_i + \vec{v}_i \wedge \vec{B}_i) \quad \text{(II-32)}$$

(★) On peut évidemment aussi considérer ce terme comme représentant l'interaction du moment magnétique de la particule i , avec le champ magnétique motionnel résultant de son mouvement dans les champs électriques créés par les particules j .

(★★) Nous n'avons pas retenu, dans cette expression, la singularité de contact. En fait, on l'obtient très simplement, quel que soit le modèle, à condition de donner une extension petite mais finie au moment magnétique (voir, par exemple C. COHEN-TANNOUJJI et al. (39)).

où \vec{E}_i et \vec{B}_i sont les champs magnétiques totaux mesurés dans le référentiel du laboratoire agissant sur la particule i ; nous avons en outre :

$$\vec{\pi}_i = \gamma_i m_i c \vec{\beta}_i$$

d'où :

$$\frac{d\vec{\pi}_i}{dt} = \frac{d\gamma_i}{dt} m_i c \vec{\beta}_i + \gamma_i m_i c \frac{d\vec{\beta}_i}{dt} \quad (\text{II-33})$$

la multiplication vectorielle à droite de (II-33) et l'utilisation de l'équation (II-32) conduisent à :

$$\vec{\omega}_T = \frac{\gamma_i}{\gamma_i + 1} \frac{e_i}{m_i c} (\vec{E}_i + c \vec{\beta}_i \wedge \vec{B}_i) \wedge \vec{\beta}_i \quad (\text{II-34})$$

Pour calculer ω_T à l'ordre $1/c^3$, il suffit alors de tenir compte de \vec{E}_i et de \vec{B}_i jusqu'à l'ordre $1/c$ inclus et il vient :

$$\mathcal{K}_{Th}^i = \frac{e_i}{2m_i^2 c^2} \sum_{j \neq i} \left[\left(\frac{e_j}{r_{ij}^3} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{\pi}_i \right) \cdot \vec{S}_i + \left(\left(\frac{\vec{\pi}_i}{m_i} \wedge \vec{B}_0 \right) \wedge \vec{\pi}_i \right) \cdot \vec{S}_i \right] \quad (\text{II-35})$$

On retrouve sur cette formulation le fait que la précession de Thomas apporte une très grosse contribution à l'interaction spin-orbite, mais aussi qu'elle est responsable de deux corrections à l'effet Zeeman : correction de Margenau et correction d'ordre tensoriel plus élevé.

c.) Hamiltonien total

On obtient le hamiltonien total après regroupement des termes indépendant du spin (II-5), du hamiltonien magnétique (II-31) et du hamiltonien de Thomas et sommation sur l'ensemble des particules. Au terme de Darwin ("Zitterbewegung") près, il est formellement identique au hamiltonien réduit (I-44) du chapitre précédent que nous reproduisons sur la page suivante. A la lumière de ce développement classique, nous pouvons maintenant commenter terme à terme ce hamiltonien : les termes \mathcal{H}_0 (hamiltonien de Schrödinger) et \mathcal{H}_1 (correction relativiste à l'énergie cinétique) sont bien connus ; nous les avons retrouvés en (II-5). Le terme \mathcal{H}_2 apparaît comme un terme purement quantique ("Zitterbewegung"); il peut s'interpréter comme un effet de moyenne de potentiel vu par

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_i m_i c^2 + \sum_{n=0}^7 \mathcal{H}_n \\
\mathcal{H}_0 &= \sum_i \frac{\pi_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j} \frac{e_i e_j}{r_{ij}} \\
\mathcal{H}_1 &= - \sum_i \frac{\pi_i^4}{8m_i^3 c^2} \\
\mathcal{H}_2 &= - \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{\pi_j e_j}{m_i c^2} (g_i - 1) \mu_{oi} \delta^3(\vec{r}_{ij}) \\
\mathcal{H}_3 &= - \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_i c^2} (g_i - 1) \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot (\vec{r}_{ij} \times \vec{\pi}_i) \\
\mathcal{H}_4 &= \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e_j}{m_j c^2} g_i \mu_{oi} r_{ij}^{-3} \vec{s}_i \cdot (\vec{r}_{ij} \times \vec{\pi}_j) \\
\mathcal{H}_5 &= - \sum_i g_i \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \vec{H} \left(1 - \frac{\pi_i^2}{2m_i^2 c^2}\right) - \sum_i (g_i - 2) \mu_{oi} \vec{s}_i \cdot \left(\frac{\pi_i^2 - \vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_i}{2m_i^2 c^2}\right) \vec{H} \\
\mathcal{H}_6 &= - \sum_{i<j} \frac{e_i e_j}{2m_i m_j c^2} \left[r_{ij}^{-1} \vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_j + r_{ij}^{-3} (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\pi}_j) (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\pi}_i) \right] \\
\mathcal{H}_7 &= - \sum_{i<j} \frac{g_i \mu_{oi} g_j \mu_{oj}}{c^2} \left[\left(\frac{8}{3} \pi\right) \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \delta^3(r_{ij}) + r_{ij}^{-5} (3 \vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ij} \vec{s}_j \cdot \vec{r}_{ij} - \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j r_{ij}^2) \right]
\end{aligned} \tag{I-44}$$

Dans cette expression, μ_{oi} représente le moment magnétique de la particule i : $e_i/2m_i$, soit pour un électron le magnétron de Bohr $\frac{e}{2m_e}$ (< 0); le facteur de Landé g_i de la particule i est relié à l'anomalie κ_i du moment magnétique introduit en (I-1) par la relation

$$g_i \mu_{oi} = 2 (\mu_{oi} + \kappa_i)$$

l'électron "délocalisé" et n'a pas d'équivalent dans notre modèle de particules localisées.

Le terme spin-orbite (\mathcal{H}_3) est la somme de deux effets; l'un, d'origine "magnétique", apparaît comme l'interaction du moment dipolaire électrique motionnel avec le champ électrique des autres électrons et du noyau et fait donc intervenir le moment anormal de l'électron alors que l'autre, d'origine purement cinématique, rend compte de la précession de Thomas du moment cinétique dans le référentiel accéléré.

L'interaction spin-autre-orbite (\mathcal{H}_4) est un terme purement magnétique qui traduit l'interaction du moment magnétique de spin avec le champ magnétique créé par le mouvement des autres électrons.

A la forme donnée en (I-44) de l'interaction du spin avec le champ magnétique externe, nous préférons la forme suivante plus explicite :

$$\mathcal{H}_5 = -\sum_i g_i \mu_{oi} \vec{S}_i \left(1 - \frac{\vec{\pi}_i \cdot \vec{\pi}_i}{2m_i^2 c^2} \right) \vec{B}_0 + \sum_i \mu_{oi} \frac{\pi_i^2}{m_i^2 c^2} (\vec{B} \cdot \vec{S}_i) - \sum_i \mu_{oi} \frac{(\vec{\pi}_i \cdot \vec{B}_0)(\vec{\pi}_i \cdot \vec{S}_i)}{m_i^2 c^2}$$

Sous cette forme, on reconnaît successivement l'interaction du spin avec le champ magnétique qu'il voit dans son référentiel propre et deux corrections relativistes d'origine purement cinématique : la correction de Margenau et une correction tensorielle du même ordre de grandeur. Leur effet global s'interprète comme une modification anisotrope de la précession de Thomas due à la présence du champ magnétique. ☆)

Le terme \mathcal{H}_6 que nous avons retrouvé en (II-5) représente l'interaction orbite-orbite; elle tient compte non seulement de l'interaction entre les 2 boucles que constituent les orbites mais également de la correction de retard à l'interaction coulombienne.

Nous retrouvons enfin en \mathcal{H}_7 l'interaction purement magnétique entre les moments magnétiques de spin des diverses particules.

En conclusion, nous constatons que l'électrodynamique classique nous a permis de rendre compte d'une façon très claire de l'essentiel des termes du hamiltonien (I-44) jusqu'à l'ordre $1/c^3$. Nous avons touché en A. aux limites de celle-ci avec le problème du rayonnement de freinage, et nous avons vu en C. qu'au terme de "Zitterbewegung" près, l'ensemble des effets relativistes obtenus à partir de l'équation de Breit généralisée étaient des effets parfaitement explicables dans le cadre de l'électrodynamique classique.

☆) En utilisant les composantes de \vec{B}_0 et \vec{S}_i perpendiculaires à la vitesse de la particule i :

$$\sum_i \mu_{oi} \frac{\pi_i^2}{m_i^2 c^2} (\vec{B}_0 \perp \cdot \vec{S}_i \perp)$$

DEUXIEME PARTIE

EFFET ZEEMAN DE L'HELIUM

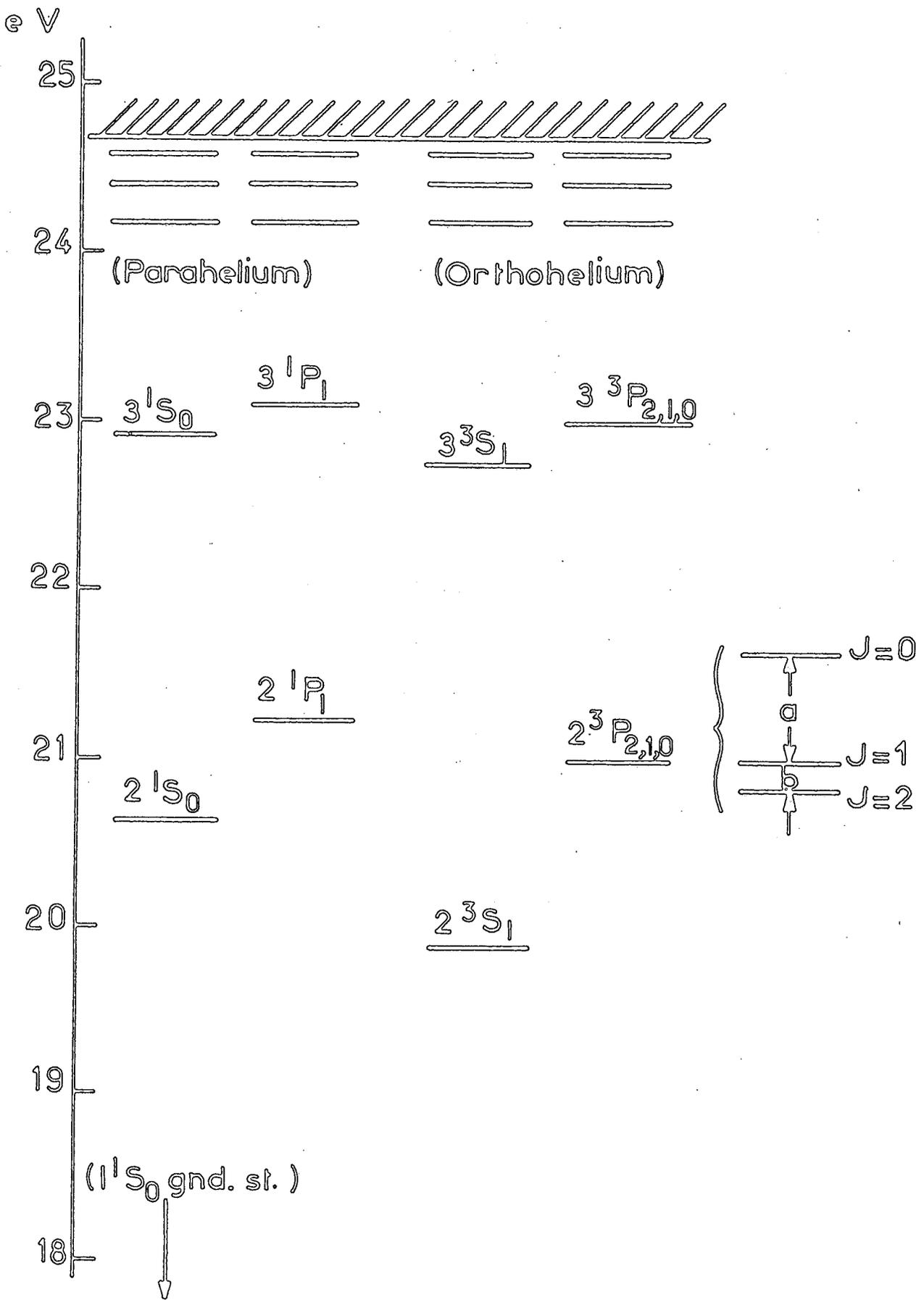


Fig. II

CHAPITRE III

EFFET ZEEMAN DES NIVEAUX 3P DE L'HELIUM

Les expériences que nous avons réalisées sur les niveaux 3P de l'hélium nous ont permis de mesurer certains des croisements des sous-niveaux Zeeman avec une précision variant de 10^{-5} à 10^{-6} (2^3P). L'exploitation de ces résultats nécessite donc une analyse du diagramme Zeeman de ces niveaux à la même précision; la première partie de cette tâche est achevée puisque nous connaissons maintenant le hamiltonien d'interaction jusqu'à un ordre suffisant (équation I-54 et tableau I-1); il reste maintenant à évaluer ce hamiltonien à l'intérieur des multiplicités 3P . Le traitement perturbatif que nous envisageons nécessite une connaissance précise des fonctions d'ondes en champ nul; nous résumons très brièvement l'ensemble des résultats acquis sur ce sujet dans le paragraphe A en insistant essentiellement sur l'analyse angulaire des états propres. Dans la mesure où le couplage en champ nul est très voisin du couplage Russell-Sanders pur, c'est dans ce couplage (L,S)J que nous ferons l'analyse tensorielle du hamiltonien Zeeman.

Après avoir rappelé les techniques graphiques très puissantes développées par YUTSIS, LEVINSON et VANAGAS (⁴⁰) pour l'étude des couplages de moments cinétiques, nous donnons en B le résultat du découplage du hamiltonien Zeeman (I-54). Grâce à ce résultat, nous démontrons en C que ce hamiltonien peut, en couplage (LS), se mettre, jusqu'à l'ordre α^3 inclus, sous une forme tensorielle extrêmement simple ne faisant intervenir que "trois paramètres de Landé", g'_S , g'_L , g'_X dont nous donnons l'expression explicite. Dans le paragraphe D, nous effectuons une évaluation des divers paramètres entrant dans l'équation des niveaux d'énergie en présence de champ en utilisant diverses approximations sur la forme des niveaux en champ nul; dans chacune de ces approximations, nous donnons une estimation de l'erreur commise.

A. Structure fine des niveaux 3P de l'hélium. Symétrie des fonctions d'onde

(Ce paragraphe représente un résumé très bref des résultats acquis sur ce sujet. Pour de plus amples précisions, nous renvoyons aux références (41)(18)(26)(42)).

En absence de champ magnétique, le hamiltonien de l'atome d'hélium s'écrit, d'après (I-44), sous la forme :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$$

où \mathcal{H}_0 représente le hamiltonien non relativiste (d'ordre $\alpha^2 mc^2$) et V les termes relativistes (spin-orbite, spin-autre-orbite, orbite-orbite, Darwin) dont les contributions d'ordre le plus bas sont en $\alpha^4 mc^2$.

Le hamiltonien non relativiste commute avec le moment orbital \vec{L} et le moment de spin \vec{S} total; ses niveaux d'énergie appelés termes spectraux sont donc de symétrie L,S pure. Par contre, les termes relativistes, responsables de la structure fine (\mathcal{H}_3 , \mathcal{H}_4 , \mathcal{H}_6 et \mathcal{H}_7 de l'équation (I-44), page 18) lèvent la dégénérescence des termes spectraux et brisent partiellement la symétrie (L,S) des fonctions d'onde. L'allure du diagramme des niveaux d'énergie est bien connue, nous la rappelons sur la figure II. Les niveaux 3P présentent une structure fine inversée très particulière, liée au fait que dans cet atome léger les interactions spin-orbite mutuelles et spin-spin sont du même ordre de grandeur que l'interaction spin-orbite classique. Les fonctions d'onde des niveaux d'énergie du triplet se mettent au premier ordre de perturbation sous la forme : $|\tilde{\psi}^{\sim} {}^3P_J \rangle$

$$|\tilde{\psi}^{\sim} {}^3P_J \rangle = |{}^3P_J \rangle + \sum_{\substack{S', L' \\ \neq {}^3P}} \frac{\langle S' L' | V | {}^3P_J \rangle}{E_{3P}^0 - E_{S' L'}^0} |S' L' J \rangle \quad (\text{III-1})$$

où les kets $|S' L' J \rangle$ représentent les états couplés $|S', L', J, M_J \rangle$ qui forment une base d'état propre de \mathcal{H}_0 , $E_{S' L'}^0$ représentant l'énergie non perturbée d'un tel état.

Les perturbations magnétiques qui brisent la symétrie 3P sont les diverses perturbations spin-orbite et spin-spin \mathcal{H}_3 , \mathcal{H}_4 , \mathcal{H}_7 de l'équation (I-44).

L'opérateur spin-orbite $\mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4$, contraction d'un tenseur irréductible de rang 1 dans l'espace des spins et d'un tenseur de même rang de l'espace des variables orbitales, explique la contamination par les états 1P , 1D , 3D et 3S . Il est pair et ne peut donc coupler qu'états de même parité. Or les états 3P étudiés (issus de configurations à un électron excité $1s, np$) sont impairs; il en résulte qu'ils ne peuvent être couplés à des états S ou D (des configurations $1s, n\ell$). L'opérateur spin-spin \mathcal{H}_7 est la contraction d'un opérateur de spin de rang 2 avec un opérateur de l'espace des variables orbitales de même rang. Agissant sur le ket $|^3P\rangle$, il donne un mélange d'états triplets P, D, F impairs.

Dans la mesure où les états perturbateurs (qu'ils soient associés à \mathcal{H}_3 , \mathcal{H}_4 ou \mathcal{H}_7) sont nécessairement impairs, il en résulte que les états S ou D perturbateurs sont nécessairement issus de configurations doublement excitées. Il en résulte que seul le mélange triplet-singlet est appréciable (le coefficient de mélange étant de $5 \cdot 10^{-4}$ environ en ce qui concerne la contamination de l'état 2^3P par le 2^1P).

Nous prévalant de ces résultats, nous écrirons dorénavant le hamiltonien de l'atome, en présence de champ magnétique, sous la forme :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{sf} + \mathcal{H}_{int}$$

où \mathcal{H}_{sf} représente le hamiltonien total en champ nul (y compris les termes de structure fine), et \mathcal{H}_{int} le hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique externe.

Projetant sur la base des vecteurs propres en champ nul, nous pouvons décrire de manière phénoménologique mais exacte le hamiltonien de structure fine \mathcal{H}_{sf} par les énergies E_j des trois niveaux du triplet. Dans la mesure où le couplage réel est très voisin du couplage (L,S) pur, nous écrirons ensuite le hamiltonien d'interaction avec le champ sur la base $|L,S,J\rangle$. Après avoir développé l'algèbre nécessaire à une telle écriture (§ B et C), nous reviendrons en D sur cette approximation, pour évaluer précisément, compte tenu de la contamination des niveaux en champ nul, l'ordre de grandeur des termes négligés dans l'interaction avec le champ.

B. Découplage du Hamiltonien d'interaction avec le champ magnétique

L'étude tensorielle du hamiltonien d'interaction (I-54) dont les divers termes correctifs sont explicités dans le tableau I-1, page 28 nécessite au préalable la réécriture sous une forme plus aisément exploitable dans la base $|L, S, J\rangle$. Utilisant les techniques usuelles (⁴³) de couplage des moments cinétiques, nous réécrivons les parties orbitales des divers termes correctifs h_i donnés dans le tableau I-1 sous la forme de produits d'opérateurs à un électron C_i^k construits sur les harmoniques sphériques :

$$C_{i q}^k = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}(\theta_i, \phi_i) \quad (\text{III-2})$$

où θ_i et ϕ_i sont les coordonnées angulaires de la position $\vec{r}_i (r_i, \theta_i, \phi_i)$ du ième électron, q la composante du tenseur d'ordre k considéré.

Cette réduction a déjà été menée à bien pour les opérateurs d'ordre α^2 par INNES et UFFORD (⁴⁴); leur calcul implique une manipulation algébrique assez lourde qui peut être considérablement allégée par l'utilisation des techniques graphiques très puissantes de YUTSIS, LEVINSON et VANAGAS (⁴⁰). Nous avons donc repris par cette méthode l'ensemble des calculs conduisant à la réduction des opérateurs h_i .

Sans vouloir expliciter l'ensemble des calculs, nous donnerons le schéma de la méthode en l'appliquant au calcul de h_4 qui est l'opérateur le plus complexe faisant intervenir le couplage de 7 opérateurs tensoriels.

L'opérateur h_4 s'écrit, d'après les résultats du tableau I sous la forme :

$$h_4 = -\alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \vec{D}$$

$$\vec{D} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i \wedge \vec{r}_j) \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{p}_i}{r_{ij}^3} - \frac{\vec{r}_i \wedge \vec{p}_j}{r_{ij}} \quad (\text{III-3})$$

□ L'utilisation extensive des opérateurs tensoriels irréductibles C^k_q permet de réécrire les composantes standard de

$$\begin{aligned} \vec{r}_i & \text{ sous la forme} & r_i C_{iq}^1 \\ \vec{r}_{ij} & & r_i C_{iq}^1 - r_j C_{jq}^1 \\ \vec{p}_i & & i\sqrt{2} r_i^{-1} \{C_i^1 \ell_i\}_q^1 - i \frac{\partial}{\partial r_i} C_{iq}^1 \end{aligned} \quad (\text{III-4})$$

expressions dans lesquelles l'indice i représente l'électron i , q la composante du tenseur d'ordre k considéré; ainsi $\{C_i^1 \ell_i\}_q^1$ représente la composante q du tenseur irréductible d'ordre 1 construit à partir de C^1 et de $\vec{\ell}$.

La démonstration de la formule (III-4) fait intervenir la forme tensorielle du produit vectoriel usuel de 2 opérateurs $T^1 \times U^1$

$$T^1 \times U^1 = -i\sqrt{2} \{T^1 U^1\}^1 \quad (\text{III-5})$$

Nous utiliserons également la décomposition sur les harmoniques sphériques de r_{ij}^{-1} et r_{ij}^{-3}

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_k (-1)^k \sqrt{[k]} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \{C_i^k C_j^k\}^0 \quad (\text{III-6})$$

$$\frac{1}{r_{ij}^3} = \frac{1}{r_{>}^2 - r_{<}^2} \sum_k (-1)^k [k]^{3/2} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \{C_i^k C_j^k\}^0 \quad (\text{III-7})$$

où $r_{<} = \min(r_i, r_j)$ et $[k] = 2k+1$ est la notation consacrée par l'usage.
 $r_{>} = \max(r_i, r_j)$

La démonstration de l'ensemble de ces formules est élémentaire, on la trouvera dans tous les livres traitant de l'algèbre des moments angulaires (voir par exemple chap. IV de la référence (43)).

L'utilisation de l'ensemble des formules (III-4, 5, 6, 7) permet de réécrire l'opérateur \vec{D} (III-3) sous la forme ;

$$\vec{D} = \sum_{\ell=1}^6 \sum_{\substack{i \neq j \\ k}} \vec{D}_{\ell}(i, j, k)$$

$$\vec{D}_1(i, j, k) = - \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{r_i}{r_j} (-1)^k [k]^{1/2} \{c_i^1 \{c_j^1 \ell_j\}^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0$$

$$\vec{D}_2(i, j, k) = + \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} r_i \frac{\partial}{\partial r_j} (-1)^k [k]^{1/2} \{c_i^1 c_j^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0$$

(III-8)

$$\vec{D}_3(i, j, k) = -\sqrt{3} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \times \frac{r_i^2}{r_{>}^2 - r_{<}^2} (-1)^k [k]^{3/2} \{c_i^1 c_j^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0 \{c_i^1 \{c_j^1 \ell_j\}^1\}^0$$

$$\vec{D}_4(i, j, k) = +\sqrt{3} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{r_i r_j}{r_{>}^2 - r_{<}^2} (-1)^k [k]^{3/2} \{c_i^1 c_j^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0 \{c_j^1 \{c_j^1 \ell_j\}^1\}^0$$

$$\vec{D}_5(i, j, k) = + \frac{\sqrt{6}}{2} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{r_i^2 r_j}{r_{>}^2 - r_{<}^2} \frac{\partial}{\partial r_j} (-1)^k [k]^{3/2} \{c_i^1 c_j^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0 \{c_i^1 c_j^1\}^0$$

$$\vec{D}_6(i, j, k) = - \frac{\sqrt{6}}{2} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{r_i r_j^2}{r_{>}^2 - r_{<}^2} \frac{\partial}{\partial r_j} (-1)^k [k]^{3/2} \{c_i^1 c_j^1\}^1 \{c_i^k c_j^k\}^0 \{c_i^1 c_j^1\}^0$$

■ L'étape suivante consiste à recoupler les opérateurs tensoriels agissant dans le même espace; c'est sur ce point que la méthode graphique permet une notable économie d'effort. Nous ne prétendons pas, dans le cadre de ce travail, présenter tous les aspects de cette méthode. Nous rapportons, en appendice III, une petite bibliographie complémentaire sur le sujet et les éléments essentiels à la compréhension des calculs. Nous utilisons, dans tout ce qui suit, les conventions de phases de BRINK et SATCHLER (⁴⁵) qui éliminent une difficulté de la théorie telle qu'elle est présentée dans l'article original de YUTSIS (⁴⁰).

Prenons donc l'exemple de la partie angulaire \hat{D}_3 de l'opérateur \vec{D}_3 ci-dessus, celle-ci fait intervenir le couplage de 7 opérateurs tensoriels : la matrice de passage d'une base couplée à une autre s'exprime donc en fonction d'un 18j plus ou moins réductible. La technique algébrique élémentaire

utilisée par INNES et UFFORD consiste à procéder par étapes à l'aide de découplage de 3 ou 4 vecteurs au maximum, puis à resommer le résultat final.

Par la méthode graphique, on aborde directement l'étude du 18j que l'on réduit entièrement graphiquement. Le problème se pose en ces termes : comment trouver le coefficient de passage de la représentation couplée

$$\widehat{D}_3 = \{ \{ C_i^1 C_j^1 \}^1 \cdot \{ C_i^k C_j^k \}^0 \{ C_i^1 \{ C_j^1 \ell_j \}^1 \}^0 \}$$

à la représentation où les électrons i et j sont découplés.

$$T^1(a,b,c,d,e) = \left\{ \left\{ \{ C_i^1 C_i^k \}^a C_i^1 \right\}^c \left\{ \left\{ \{ C_j^1 C_j^k \}^b C_j^1 \right\}^e \ell_j \right\}^d \right\}^1$$

Remarquons que le couplage de \widehat{D}_3 n'est pas entièrement précisé (l'absence d'ambiguïté étant liée à la présence des produits scalaires); pour l'utilisation de la méthode générale, il faut préciser un ordre de couplage ce que nous pourrions faire de maintes façons différentes; pour fixer les idées, nous choisirons le couplage

$$\widehat{D}_3 = \left\{ \left\{ \{ C_i^1 C_j^1 \}^1 \{ C_i^k C_j^k \}^0 \right\}^1 \{ C_i^1 \{ C_j^1 \ell_j \}^1 \}^0 \right\}^1$$

En d'autres termes, nous cherchons donc la matrice de passage du couplage

$$(((J_1 J_2) J_{12} (J_3 J_4) J_{34}) J_{1234} (J_5 (J_6 J_7) J_{67}) J_{567}) J$$

au couplage

$$(((J_1 J_3) J_{13} J_5) J_{135} (((J_2 J_4) J_{24} J_6) J_{246} J_7) J_{2467}) J$$

(nous travaillons ici sur des opérateurs tensoriels et par suite les J sont tous entiers).

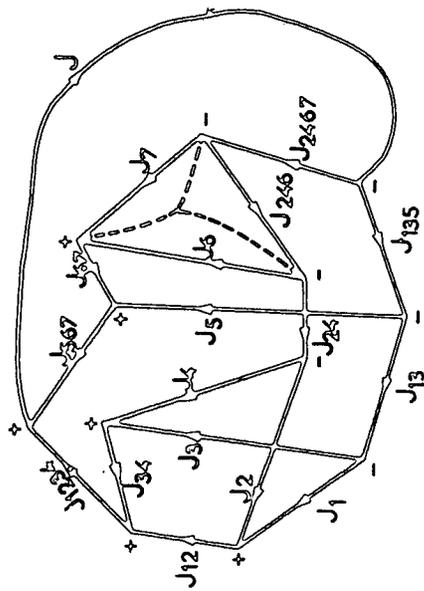
Ses éléments de matrice sont égaux au produit d'un 18j représenté sur la figure III par le facteur de pondération

$$\left[\pi[a_i] \pi[b_i] \right]^{1/2}$$

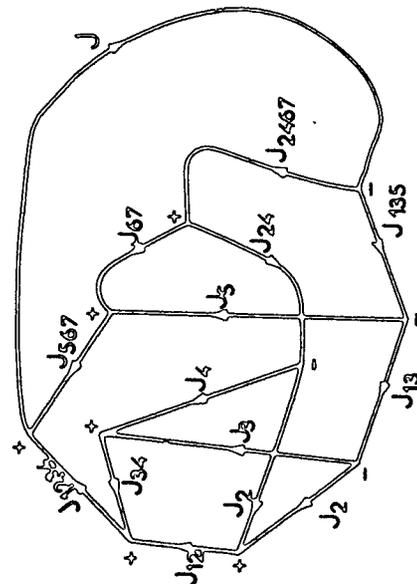
où les a_i et b_i représentent respectivement les vecteurs intermédiaires du couplage de départ et de celui d'arrivée, soit :

$$\pi[a_i] = [J_{12}] [J_{34}] [J_{1234}] [J_{67}] [J_{567}]$$

- a -

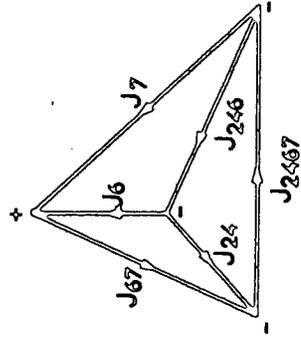


=



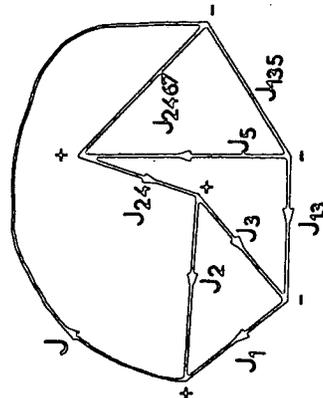
- b -

- c -



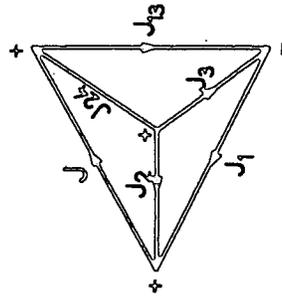
$$(-1) \left. \begin{matrix} J_6 + J_7 + J_{67} \\ J_6 \quad J_{24} \quad J_{246} \\ J_{2467} \quad J_7 \quad J_{67} \end{matrix} \right\}$$

- d -



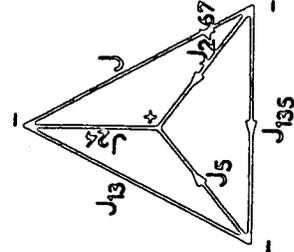
$$\times \frac{1}{\sqrt{[J_{12}][J_1][J_3][J_5]}}$$

- e -



$$(-1) \left. \begin{matrix} J_1 + J_2 + J_{13} \\ J_1 \quad J_2 \quad J_{24} \\ J_1 \quad J_{13} \quad J_2 \end{matrix} \right\}$$

- f -



$$(-1) \left. \begin{matrix} J_{24} + J_5 + J_{2467} \\ J_{24} \quad J_{2467} \quad J_5 \\ J_{195} \quad J_{13} \quad J_5 \end{matrix} \right\}$$

Fig - III

$$\pi [b_i] = [J_{13}] [J_{135}] [J_{24}] [J_{246}] [J_{2467}]$$

Réduction graphique du (18j) : utilisant les règles rappelées dans l'appendice III, le (18j) en question prend la forme a fig. III; la suppression du triangle ($J_6J_7J_{246}$) par pincements des lignes $J_6J_7J_{246}$ (selon les pointillés sur fig. a) conduit au produit simple des deux diagrammes b et c de la figure III.

Dans le diagramme c, on reconnaît au signe des noeuds près, c'est-à-dire à un facteur de phase près, le coefficient (6j) habituel (dont tous les noeuds sont positifs).

Au stade suivant de la réduction du coefficient b de la figure III, nous tiendrons compte de l'existence de deux moments cinétiques nuls J_{34} et J_{567} ce qui nous permet de supprimer les lignes correspondantes (non les noeuds); la suppression des noeuds auxquels aboutissent deux moments cinétiques seulement (j_1j_2) se fait par introduction du coefficient $\delta(j_1j_2) [j_1]^{-1/2}$. Ces deux opérations permettent de mettre le coefficient b sous la forme d (nous attirons l'attention sur le changement de signe des 2 noeuds centraux nécessité par une déformation locale du diagramme ne respectant plus l'orientation respective des vecteurs du couplage). Poursuivant l'utilisation de la technique de pincements des lignes liées le diagramme d se sépare en deux diagrammes plus simples qui sont, à un facteur de phase près, des coefficients 6j.

Regroupant l'ensemble de ces résultats, nous trouvons que l'opérateur \hat{D}_3 se met sous la forme :

$$\hat{D}_3 = - \sum_{a,b,c,d,e} \sqrt{\frac{[a][b][c][d][e]}{[k]}} \begin{Bmatrix} 1 & b & e \\ d & 1 & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & b & k \\ a & 1 & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & b & d \\ 1 & c & a \end{Bmatrix} T(a,b,c,d,e) \quad (\text{III-9})$$

□ L'étape suivante consiste à réduire l'expression $T(a,b,c,d,e)$ en tenant compte de la relation classique de contraction des opérateurs C^k agissant sur un même espace :

$$\left\{ C^{k_1} C^{k_2} \right\}^K = (-1)^K [K]^{1/2} \begin{Bmatrix} k_1 & K & k_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} C^K \quad (\text{III-10})$$

$$h_1 = + \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i (\vec{s}_i + 2\vec{s}_i) T_i$$

$$h_2 = - \frac{1}{3} \alpha^2 2 \mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \frac{1}{r_i} \left[\vec{s}_i + \frac{5}{2} \{ \vec{s}_i C_i^2 \}^1 \right]$$

$$h_3 = - \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \left[\vec{S} B^0 + \{ \vec{S} B^2 \}^1 + \vec{\Delta} A^0 + \{ \vec{\Delta} A^1 \}^1 + \{ \vec{\Delta} A^2 \}^1 \right] \quad \text{avec } \vec{\Delta} = \vec{s}_1 - \vec{s}_2$$

$$B^0 = \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \sum_k \Sigma (-1)^{k+1} \sqrt{(2k+1)} \frac{r_i^k}{r_j^{k+1}} \{ C_i^k C_j^k \}^0$$

$$B^2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_k \Sigma (-1)^{k+1} \sqrt{\frac{k(k+1)(2k-1)(2k+3)}{(2k+1)}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2k+1}{(2k-1)(2k+3)} \frac{r_i^k}{r_j^{k+1}} \{ C_i^k C_j^k \}^2 \right. \\ \left. - \frac{3}{4} \left(\frac{r_i^{k-1}}{r_j^k} - \frac{r_i^{k+1}}{r_j^{k+2}} \right) \{ C_i^{k-1} C_j^{k+1} \}^2 \right]$$

$$A^0 = \frac{1-P_{12}}{2} \left(\frac{1}{3} \sum_k \Sigma (-1)^{k+1} (2k+1)^{3/2} \frac{r_i^k}{r_j^{k+1}} \{ C_i^k C_j^k \}^0 \right)$$

$$A^1 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \sum_k \Sigma (-1)^{k+1} \sqrt{k(k+1)(2k+1)} \frac{r_i^k}{r_j^{k+1}} \{ C_i^k C_j^k \}^1$$

$$A^2 = \left(\frac{1-P_{12}}{2} \right) \left\{ \sum_k \frac{(-1)^{k+1}}{3\sqrt{2}} \sqrt{\frac{k(k+1)}{(2k-1)(2k+3)}} (2k+1) \frac{r_2^k}{r_1^{k+1}} \{ C_1^k C_2^k \}^2 \right. \\ \left. + \sum_k \frac{(-1)^{k+1}}{2\sqrt{3}} \sqrt{\frac{k(k+1)(2k-1)(2k+3)}{(2k+1)}} \left(\frac{r_2^{k+1}}{r_1^{k+2}} + \frac{r_2^{k-1}}{r_1^k} \right) \{ C_1^{k+1} C_2^{k-1} \}^2 \right\}$$

$$h_4 = - \alpha^2 \mu_B \vec{H} \cdot \vec{D}^1$$

$$\vec{D}^1 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{i \neq j} \sum_k \Sigma \left\{ (-1)^k \left(\frac{r_i^{k+2}}{r_j^{k+3}} + \frac{r_j^k}{r_i^{k+1}} \right) \right.$$

$$\left. \left[\frac{k(k+3)}{2k+3} \sqrt{2k+1} \{ C_i^k \{ C_j^k e_j \}^k \}^1 - \frac{k(k+3)}{2k+3} \sqrt{2k+5} \{ C_i^{k+2} \{ C_j^{k+2} e_j \}^{k+2} \}^1 \right] \right.$$

$$\left. - 2 \frac{(2k+1)}{\sqrt{2k+3}} \{ C_i^k \{ C_j^k e_j \}^{k+1} \}^1 - 2 \sqrt{\frac{k+1}{k+2} \frac{(2k+1)(2k+5)}{2k+3}} \{ C_i^{k+2} \{ C_j^k e_j \}^{k+1} \}^1 \right]$$

$$+ (-1)^k \left(\frac{k+3}{2k+3} \frac{r_i^{k+2}}{r_j^{k+2}} - \frac{k}{2k+3} \frac{r_j^{k+1}}{r_i^{k+1}} \right) \frac{\partial}{\partial r_j} \left[\sqrt{k(k+1)(2k+1)} \{ C_i^k C_j^k \}^1 - \sqrt{(k+2)(k+3)(2k+5)} \{ C_i^{k+2} C_j^{k+2} \}^1 \right]$$

$$h_5 = + \frac{m}{M} \mu_B \vec{H} \cdot \vec{E}^1$$

$$\vec{E}^1 = \sum_{i \neq j} \frac{2r_i}{r_j} \left\{ C_i^1 \{ C_j^1 e_j \}^1 \right\}^1 - \sqrt{2} r_i \{ C_i^1 C_j^1 \}^1 \frac{\partial}{\partial r_j}$$

$$h_6 = \frac{\alpha^3}{2\pi} \mu_B \vec{H} \cdot \left[\frac{1}{3} \sum_i \vec{s}_i T_i - \frac{5}{3} \vec{F}^1 \right]$$

$$\vec{F}^1 = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \vec{s}_i \cdot \{ \vec{p}_i \vec{p}_i \}^2 \right\}^1 + \frac{1}{2} \left\{ \vec{\Delta} \cdot \{ \vec{p}_1 \vec{p}_1 \}^2 - \{ \vec{p}_2 \vec{p}_2 \}^2 \right\}^1$$

$$h_7 = + \frac{\alpha}{\pi} h_2$$

$$h_8 = - \frac{2}{3} \frac{\alpha^3}{\pi} \mu_B \vec{H} \cdot \left[\vec{S} B^0 + \{ \vec{S} B^2 \}^1 \right]$$

moyennant quoi l'opérateur T se met sous la forme :

$$T(a,b,c,d,e) = \sqrt{[a][b][c][e]} \begin{pmatrix} 1 & a & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & b & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & c & a \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & e & b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \{C_i^c \{C_j^e \lambda_j\}^d\}^1 \quad (\text{III-11})$$

Il y a lieu alors de remarquer que les indices a et b sont muets et qu'il y a donc éventuellement possibilité d'effectuer une resommation sur ceux-ci. Celles-ci faites, il y a lieu d'explicitier en fonction de k les opérateurs T(abcde).

□ L'étape ultime du calcul nécessite la resommation des D_i donnés par les équations (III-8) avec réarrangement éventuel des termes par utilisation de la sommation sur l'indice k.

Tous calculs faits, on obtient les résultats résumés dans le tableau III-2. Les notations utilisées sont celles du texte ci-dessus; nous avons de plus introduit les notations suivantes :

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$$

$$\vec{\Delta} = \vec{s}_1 - \vec{s}_2$$

P_{12}^k représente l'opérateur de permutation des particules

$$\frac{r_i^k}{r_j^k} \text{ implique } r_i \leq r_j$$

d'où il s'ensuit que :

$$\frac{r_{<}^k}{r_{>}^k} = \frac{r_i^k}{r_j^k} + \frac{r_j^k}{r_i^k}$$

Il faut noter que la forme de h_3 donnée ici diffère du résultat des références antérieures sur ce sujet ⁽⁴⁴⁾(⁴⁶)(⁴⁷), car les auteurs précités fondent leurs calculs sur le hamiltonien dérivé par ABRAGAM et VAN VLECK ⁽¹²⁾(¹³) non symétrique dans l'échange des électrons. Il est facile de montrer que cette décomposition est identique au hamiltonien symétrisé des différents auteurs précités; par ailleurs, cette forme symétrisée est infiniment plus commode pour l'analyse tensorielle qui suit.

Nous n'avons pas effectué la décomposition tensorielle de h_9 et h_{10} car leur étude directe à partir de la formule donnée dans le tableau I-1 montre que ce sont des termes dont l'ordre de grandeur (quelques $10^{-8} \mu_B H$) est très inférieur à la précision souhaitée dans le cadre de ce travail.

C. Analyse tensorielle et forme phénoménologique du hamiltonien Zeeman des niveaux 3P

a) Forme tensorielle du hamiltonien d'interaction dans une base $|LSJ\rangle$

Compte tenu de la forme tensorielle des opérateurs $h_1 - h_8$ (tableau III-2), l'application du théorème de Wigner-Eckart nous permet de démontrer qu'à l'intérieur d'un terme spectral (L,S) donné et à l'ordre α^3 , le hamiltonien linéaire en champ se met exactement sous la forme

$$\mathcal{H}_\ell = -g'_L \mu_B \vec{L} \cdot \vec{H} - g'_S \mu_B \vec{S} \cdot \vec{H} - g'_X \mu_B \vec{H} \cdot \{ \vec{S} \hat{O}^2 \}^1 \quad (\text{III-12})$$

où \hat{O}^2 est un opérateur irréductible de rang 2 de l'espace des variables orbitales que nous déterminerons complètement de façon à identifier le coefficient g'_X avec celui introduit antérieurement par S.A. LEWIS (⁴⁶), ce qui impose :

$$\langle L = 1 || \hat{O}^2 || L = 1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \quad (\text{III-13})$$

les différents facteurs g'_S , g'_L , g'_X ont alors comme expressions explicites dans une multiplicité 3P :

$$g'_L = g_L + \frac{\alpha^2}{\sqrt{6}} \left\{ -\langle \tau L || \Sigma \vec{\ell}_i \tau_i || \tau L \rangle + \langle \tau L || D^1 || \tau L \rangle \right\} \quad (\text{III-14})$$

$$- \frac{m}{M} \times \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \tau L || E^1 || \tau L \rangle$$

$$\begin{aligned}
g'_s = g_s + \frac{\alpha^2}{\sqrt{3}} \{ & - \langle \tau L | | \sum_i \tau_i | | \tau L \rangle + \frac{1}{3} \langle \tau L | | \sum_i \frac{1}{r_i} | | \tau L \rangle + \langle \tau L | | B^0 | | \tau L \rangle \} \\
& + \frac{\alpha^3}{\pi \sqrt{3}} \{ - \frac{1}{12} \langle \tau L | | \sum_i \tau_i | | \tau L \rangle + \frac{1}{3} \langle \tau L | | \sum_i \frac{1}{r_i} | | \tau L \rangle \\
& + \frac{2}{3} \langle \tau L | | B^0 | | \tau L \rangle \} \quad \text{(III-15)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g'_x = -\alpha^2 \sqrt{3} \{ & \frac{5}{6} \langle \tau L | | \sum_i \frac{C_i^2}{r_i} | | \tau L \rangle + \langle \tau L | | B^2 | | \tau L \rangle \} \\
-\alpha^3 \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \{ & \frac{5}{6} \langle \tau L | | \sum_i \{ \vec{p}_i \vec{p}_i \}^2 | | \tau L \rangle + \frac{5}{3} \langle \tau L | | \sum_i \frac{C_i^2}{r_i} | | \tau L \rangle \\
& + \frac{4}{3} \langle \tau L | | B^2 | | \tau L \rangle \} \quad \text{(III-16)}
\end{aligned}$$

Remarque 1 :

Les premiers termes négligés dans un tel point de vue proviennent des corrections h_1, h_2, h_3, h_6, h_7 et sont non diagonaux en L,S. Ils ne modifient les niveaux étudiés qu'au 2ème ordre de perturbation, ce qui correspond à des termes d'ordre α^4 au moins, dont il n'y a pas lieu de tenir compte dans notre point de vue qui repose sur un développement perturbatif jusqu'à l'ordre α^3 seulement.

Remarque 2 :

Cette démonstration établit de manière générale le comportement angulaire de l'opérateur \mathcal{H}_ρ jusqu'à l'ordre $\alpha^3 \mu_B H$ inclus et justifie pleinement l'introduction des quantités g'_L, g'_s, g'_x (46)(47) qui sont les quantités directement accessibles à l'expérience. Ce résultat ne préjuge pas de la forme exacte des fonctions d'ondes (contrairement aux affirmations des auteurs précédemment cités), mais seulement de leur symétrie générale (L,S); il permet donc de tenir compte éventuellement de toutes les interactions de configuration de même symétrie que le niveau étudié, ce qui revient, dans notre cas, à négliger dans l'ordre d'importance décroissante les perturbations dues au mélange par les interactions magnétiques des configurations intermédiaires à symétrie $1P, 1D, 3D, 3F$ (ces corrections sont également d'ordre α^4 ; nous en discuterons plus précisément l'ordre de grandeur dans le paragraphe D).

L'effet diamagnétique enfin, qui croît en première approximation comme $n^4 H^2$, introduit dans notre étude d'effet Zeeman en fort champ une correction non négligeable même dans l'état $n=2$. Le hamiltonien correspondant donné par (I-53) se met sous la forme :

$$\mathcal{H}_a = \frac{(\mu_B H)^2}{6R_\infty} \sum_i (1 - C_{i0}^2) r_i^2 \quad (\text{III-17})$$

(Dans le cadre de notre travail, seul le 1er terme de (I-53) est important. En effet, le champ magnétique où se produisent les croisements de niveaux de structure fine doit être de l'ordre de l'énergie de structure fine divisée par μ_B soit :

$$\mu_B H \sim \alpha^4 m c^2$$

le 1er terme du hamiltonien quadratique est donc d'ordre $\sim \alpha^2 \mu_B H$

le terme suivant serait d'ordre $\alpha^2 \frac{m}{H} \mu_B H$, donc négligeable au même titre que les corrections h_9 et h_{10} à l'effet Zeeman linéaire.)

La description de \mathcal{H}_a dans une multiplicité $(L,S)J$ fait donc intervenir deux nouveaux paramètres que nous définirons comme suit :

$$\tilde{S}^0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \tau_L | | \sum_i r_i^2 | | \tau_L \rangle \quad (\text{III-18})$$

$$\tilde{S}^2 = \sqrt{\frac{5}{6}} \langle \tau_L | | \sum_i r_i^2 C_{i0}^2 | | \tau_L \rangle \quad (\text{III-19})$$

En fait seul le paramètre \tilde{S}^2 qui mesure la partie anisotrope de l'interaction diamagnétique sera utile dans notre problème, la partie isotrope introduisant un shift de l'ensemble du terme spectral auquel les expériences de croisement de niveaux ne sont pas sensibles.

b) Le diagramme Zeeman des niveaux 3P

Moyennant l'analyse que nous venons de faire, il apparaît que le diagramme Zeeman des niveaux 3P peut se décrire jusqu'à l'ordre α^3 (c'est-à-dire avec une précision supérieure ou égale à 1 ppm) à l'aide de 8 paramètres :

- . les 3 énergies E_j des niveaux du triplet en champ nul
- . les 3 facteurs de Landé g'_s , g'_L , g'_x
- . les 2 paramètres \tilde{S}^0 et \tilde{S}^2 mesurant la force de l'interaction diamagnétique

C'est ainsi que les énergies des niveaux tracés sur la figure IV sont données par le système d'équations du tableau III-3.

TABLEAU III-3

sous-niveaux $m_j = \pm 2$

$$E = \pm (g'_s + g'_L + \frac{1}{15} g'_x) \mu_B H + Q (\tilde{S}^0 + \frac{1}{5} \tilde{S}^2)$$

sous-niveaux $m_j = \pm 1$

$$\left| \begin{array}{l} E_{12} \pm \frac{1}{2} (g'_s + g'_L - \frac{1}{3} g'_x) \mu_B H + Q (\tilde{S}^0 + \frac{2}{5} \tilde{S}^2) - \epsilon \quad \pm \left\{ \frac{3}{10} Q \tilde{S}^2 - \frac{1}{2} (g'_s - g'_L - \frac{2}{15} g'_x) \mu_B H \right\} \\ \pm \left\{ \frac{3}{10} Q \tilde{S}^2 - \frac{1}{2} (g'_s - g'_L - \frac{2}{15} g'_x) \mu_B H \right\} \quad \pm \frac{1}{2} (g'_s + g'_L + \frac{1}{15} g'_x) \mu_B H + Q (\tilde{S}^0 + \frac{2}{5} \tilde{S}^2) - \epsilon \end{array} \right| = 0$$

sous-niveaux $m_j = 0$

$$\left| \begin{array}{lll} E_{02} + Q \tilde{S}^0 - \epsilon & -\sqrt{\frac{2}{3}} (g'_s - g'_L + \frac{1}{6} g'_x) \mu_B H & \frac{\sqrt{2}}{5} Q \tilde{S}^2 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} (g'_s - g'_L + \frac{1}{6} g'_x) \mu_B H & E_{12} + Q (\tilde{S}^0 + \frac{1}{5} \tilde{S}^2) - \epsilon & -\sqrt{\frac{1}{3}} (g'_s - g'_L - \frac{2}{15} g'_x) \mu_B H \\ \frac{\sqrt{2}}{5} Q \tilde{S}^2 & -\sqrt{\frac{1}{3}} (g'_s - g'_L - \frac{2}{15} g'_x) \mu_B H & Q (\tilde{S}^0 - \frac{1}{5} \tilde{S}^2) - \epsilon \end{array} \right| = 0$$

Dans ce système d'équations, l'origine des énergies est prise au niveau 3P_2 en champ nul

$$E_{12} = E_1 - E_2 \quad ; \quad E_{02} = E_0 - E_2$$

$$Q = \frac{(\mu_B H)^2}{6R_\infty}$$

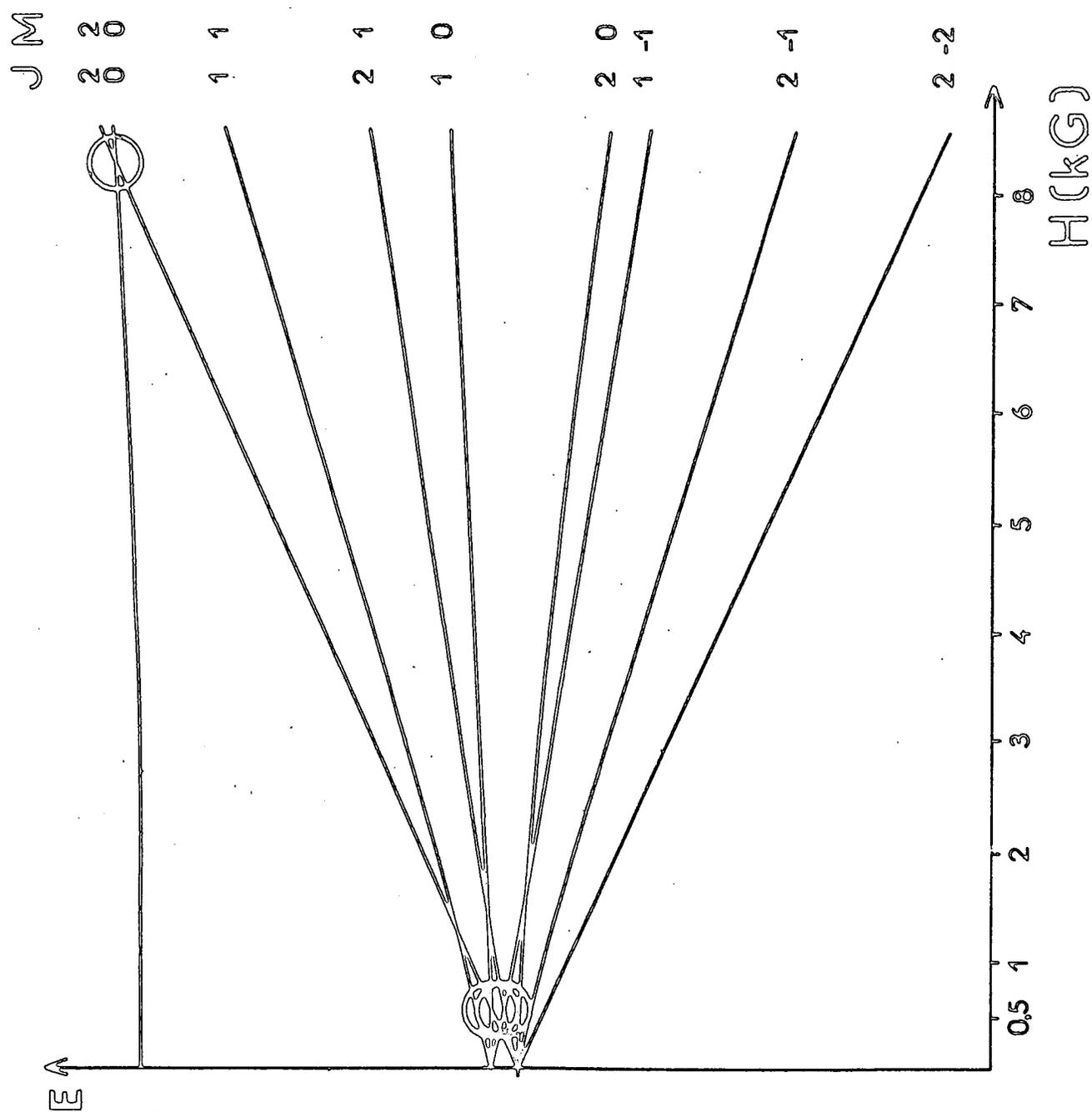


Diagramme Zernik des $3P$ de l'helium

Fig. IV

En conclusion, nous voyons que le problème de la détermination de la position des croisements de niveaux avec une précision d'un ppm nécessite la connaissance de 6 paramètres :

- . les écarts d'énergies en champ nul E_{12} , E_{02}
- . les facteurs de Landé g'_S , g'_L , g'_X
- . la partie anisotrope de l'interaction diamagnétique \tilde{S}^2

Le nombre des paramètres du problème étant très supérieur au nombre de données expérimentales que nous pouvons espérer obtenir avec notre montage expérimental (à savoir la position des trois croisements $\Delta m = 2$ encerclés sur le diagramme de la figure IV), il y a donc lieu d'introduire soit des données expérimentales, soit des résultats supplémentaires. Nous expliquerons, niveau par niveau, nos choix en ce domaine dans le chapitre suivant où nous présentons nos résultats expérimentaux et leur exploitation. Cet examen nous a prouvé, en particulier, qu'il serait souhaitable d'avoir des estimations théoriques des facteurs de Landé et des coefficients de l'interaction diamagnétique; c'est donc le point que nous aborderons maintenant.

D. Facteurs de Landé et effet diamagnétique des niveaux 3P : résultats numériques ($n = 2, 3, 4$)

Le calcul explicite des coefficients g'_S , g'_L , g'_X , \tilde{S}^2 , nécessite la connaissance des fonctions d'onde radiales de l'hélium. Notre première approximation (a) consiste à utiliser des fonctions d'onde hydrogénoïdes. Le gros défaut d'une telle approximation, c'est qu'elle ne permet pas de tenir compte des corrélations électroniques ou, en d'autres termes, des interactions de configuration.

Nous reportons donc dans le paragraphe b) les résultats de M. LEWIS (⁴⁷) concernant le niveau 2^3P qui tiennent partiellement compte des interactions de configurations; la confrontation avec les résultats du paragraphe a) prouve que le coefficient g'_L est particulièrement sensible à ces effets comme on pouvait l'imaginer a priori.

Reprenant alors systématiquement l'étude des intégrales radiales calculées en a), nous faisons une estimation de l'ordre de grandeur des erreurs commises sur chacune d'elles, en comparant soit à des intégrales voisines calculées avec des fonctions d'ondes prenant en compte les effets de corrélations, soit avec divers résultats expérimentaux (§ c). Nous terminons cette estimation dans le paragraphe d en calculant l'ordre de grandeur des termes négligés.

a) Calcul des facteurs g'_S , g'_L , g'_X , \tilde{S}^0 , \tilde{S}^2 des niveaux n^3P dans le cadre d'une approximation hydrogénéoïde

Dans un premier temps, nous négligeons les corrélations entre électrons en écrivant dans une approximation hydrogénéoïde la fonction d'onde radiale des états 3P sous la forme :

$$\psi(n^3P) = \frac{1 - P_{12}}{\sqrt{2}} [\psi_{1s}(r_1) \psi_{np}(r_2)]$$

Utilisant les diverses intégrales radiales directes et d'échange $R_1 - R_{18}$ dont la signification est explicitée dans le tableau III-4, les différents facteurs se mettent sous la forme : ☆)

$$g'_L = g_L + \alpha^2 \left[-R_2 - \frac{1}{3} (R_5 + R_8) + \frac{2}{15} (R_7 + R_9) + \frac{1}{30} (R_{10} - R_{11}) - \frac{2}{15} (R_{12} - R_{13}) \right] + \frac{m}{M} \left[\frac{1}{3} R_{16} - \frac{1}{3} R_{17} + \frac{2}{3} R_{18} \right] \quad (\text{III-20})$$

$$g'_S = g_S + \alpha^2 \left[-R_1 - R_2 + \frac{1}{3} R_3 + \frac{1}{3} R_4 - \frac{1}{2} R_5 - \frac{1}{2} R_6 + \frac{1}{3} R_7 \right] \quad (\text{III-21})$$

$$g'_X = \alpha^2 \left[R_4 - \frac{3}{2} R_6 - 2R_7 + \frac{3}{2} R_8 \right] \quad (\text{III-22})$$

$$\tilde{S}^0 = R_{14} + R_{15} \quad (\text{III-23})$$

$$\tilde{S}^2 = R_{15} \quad (\text{III-24})$$

Tous les résultats numériques sont exprimés en unités atomiques.

☆)

Dans ce type de calcul, il est illusoire de tenir compte des termes d'ordre α^3 qui, comme nous le montrons plus loin, sont totalement négligeables devant les incertitudes liées à la connaissance de la fonction d'onde.

TABLEAU III-4

| | 2 ³ P | 3 ³ P | 4 ³ P |
|---|----------------------|--------------------------|------------------|
| $R_1 = \langle sp T_1 sp \rangle$ | 1.98 | 2. | 2. |
| $R_2 = \langle sp T_2 sp \rangle$ | 0.149 | .055 | .031 |
| $R_3 = \langle sp \frac{1}{r_1} sp \rangle$ | 1.99 | 2. | 2. |
| $R_4 = \langle sp \frac{1}{r_2} sp \rangle$ | 0.273 | .111 | .0625 |
| $R_5 = \langle sp \frac{1}{r_1} sp \rangle$ $r_2 \leq r_1$ | 4.6×10^{-3} | 10^{-3} | |
| $R_6 = \langle ps \frac{1}{r_1} ps \rangle$ $r_2 \leq r_1$ | 0.267 | .110 | .0619 |
| $R_7 = \langle ps \frac{r_1}{r_2^2} sp \rangle$ $r_1 \leq r_2$ | 7.9×10^{-3} | 7×10^{-3} | |
| $R_8 = \langle sp \frac{r_1^2}{r_2^3} sp \rangle$ $r_1 \leq r_2$ | 0.025 | 5.5×10^{-3} | |
| $R_9 = \langle ps \frac{r_1^3}{r_2^4} sp \rangle$ $r_1 \leq r_2$ | diverge | diverge | |
| $R_{10} = \langle ps \frac{r_2^2 \partial r_2}{r_1^2} sp \rangle$ $r_2 \leq r_1$ | 0.003 | 7×10^{-4} | |
| $R_{11} = \langle sp \frac{r_2^2 \partial r_2}{r_1^2} ps \rangle$ $r_2 \leq r_1$ | -0.0177 | -11×10^{-3} | |
| $R_{12} = \langle ps \frac{r_1^3 \partial r_2}{r_2^3} sp \rangle$ $r_1 \leq r_2$ | $R_9 - 0.0036$ | $R_9 - 9 \times 10^{-4}$ | |
| $R_{13} = \langle sp \frac{r_1^3 \partial r_2}{r_2^3} ps \rangle$ $r_1 \leq r_2$ | -0.0133 | -33×10^{-3} | |
| $R_{14} = \langle sp r_1^2 sp \rangle$ | 0.758 | 0.75 | |
| $R_{15} = \langle ps r_1^2 ps \rangle$ | 25.25 | 180 | 600 |
| $R_{16} = \langle ps r_1 \partial r_2 sp \rangle$ | 0.020 | 4.10^{-3} | |
| $R_{17} = \langle sp r_1 \partial r_2 ps \rangle$ | -0.1339 | -30.10^{-3} | |
| $R_{18} = \langle ps \frac{r_1}{r_2} sp \rangle$ | 0.0569 | 13.10^{-3} | |

Dans le niveau $n = 2$, les différentes intégrales ont été calculées en utilisant des fonctions d'onde hydrogénoïdes avec paramètres d'écran déterminés par ECKART (⁴⁸) par méthode variationnelle ($Z_1 = 1,99$, $Z_2 = 1,09$). Dans les niveaux $n = 3$ et 4 , l'écrantage a été supposé total (la charge "vue" par l'électron s étant prise égale à 2 , celle vue par l'électron p à 1). Les résultats concernant les facteurs de Landé et l'effet diamagnétique sont regroupés avec ceux des autres approximations dans les tableaux III-5 et III-6.

b) Comparaison avec les résultats obtenus dans le cadre d'une approximation tenant compte des interactions de configurations

L'équation de Schrödinger n'est pas résolue exactement pour l'hélium mais de bonnes approximations analytiques et numériques ont été développées depuis bien longtemps : en particulier, des séries de fonctions de HYLLERAAS (⁴⁹) donnent, par méthode variationnelle, d'excellentes approximations de l'énergie si l'on utilise un nombre suffisant de termes. La base standard de HYLLERAAS pour la description d'un état 3P (antisymétrique dans l'échange des coordonnées des électrons) est de la forme :

$$\left[\psi_{\ell mn}(1,2) \right]_M^{J=1} = \frac{1-P_{12}}{4\pi\sqrt{2}} \sum_{\ell, m, n=0}^{\ell+m+n \leq \omega} r_1 r_1^{m,n} r_2 r_{12}^{\ell} e^{-(K\sigma/2)r_1} e^{-(K/2)r_2} C_m^1(\theta_1, \phi_1) \quad (\text{III-25})$$

C'est en développant l'état 2^3P sur une base de ce genre que SCHWARTZ (⁴²) a calculé une valeur présumée valable à 1 ppm près des premiers termes de la structure fine (en $\alpha^4 mc^2$) et c'est également sur cette base qu'ont été poursuivis les calculs de tous les opérateurs d'ordre supérieur (²)(²⁹)(³⁰).

Utilisant un développement de ce genre, M. LEWIS (⁴⁷) a ainsi calculé les facteurs g'_s , g'_L , g'_x du niveau 2^3P et les coefficients g'_s des niveaux $n = 3, 4$ (⁵⁰). Ses résultats sont reportés dans le tableau III-5.

| | $(g'_S - g_S) \times 10^6$ | $(g'_L - g_L) \times 10^6$ | $g'_X \times 10^6$ |
|-------------------------------|----------------------------|----------------------------|--------------------|
| Nos calculs hydrogénéoïdes | $-80,3 \pm 4$ | 4 ± 12 | -6 ± 6 |
| M. LEWIS (47) (HYLLERAAS) | $-80,46 \pm 0,01$ | $10,6 \pm 0,4$ | $-3,5 \pm 2,5$ |
| hydrogénéoïdes | -75 ± 4 | -1 ± 3 | -3 ± 3 |
| M. LEWIS (50) (HYLLERAAS) | $-75,08$ | | |
| hydrogénéoïdes | -73 ± 4 | -2 ± 2 | -2 ± 2 |
| M. LEWIS (50) (HYLLERAAS) | $-73,25$ | | |

TABLEAU III-5

La comparaison des calculs hydrogénéoïdes avec ceux utilisant une base de HYLLERAAS montre que la prise en considération des corrélations est particulièrement critique dans le calcul de g'_L et g'_X . Ce résultat était prévisible pour g'_L dans la mesure où la contribution de h_5 (correction à la polarisation de masse) y est particulièrement importante. Les incertitudes notées dans le calcul de M. LEWIS sont des incertitudes numériques estimées par l'auteur sur la base de la convergence des calculs numériques à travers la séquence des fonctions utilisées (nous discutons dans le paragraphe d) de l'ordre de grandeur des termes négligés).

Dans le cadre de l'approximation hydrogénéoïde, nous avons fait les remarques suivantes pour évaluer l'incertitude entachant nos résultats : l'essentiel des corrections provient des intégrales $R_1 - R_6$ et $R_{17} - R_{18}$; les deux premières intégrales sont essentiellement des intégrales d'énergie; dans le niveau $n = 2$, on peut leur assigner la même précision que celle du calcul variationnel d'Eckart qui a servi à déterminer les paramètres d'écran, soit 2%. D'autre part, la moyenne $\frac{R_3 + R_4}{2}$ est comparable à une intégrale radiale calculée avec grande précision par ACCAD et al. (51), dans le cadre d'une approximation avec corrélations : la différence entre

les deux approximations est respectivement de 2×10^{-3} , 3×10^{-3} et 10^{-3} dans le niveau $n = 2, 3, 4$, ce qui semble justifier l'incertitude de 2% que nous assignons à chacune des intégrales $R_1 - R_4$. Les incertitudes sur R_5 et R_6 sont vraisemblablement plus grandes (l'importance des corrélations étant renforcée par la contrainte $r_1 \leq r_2$), nous les avons estimées à 20%. L'incertitude notée sur g'_s , g'_L et g'_x dans le tableau III-5 tient compte d'une incertitude de 100% sur toutes les autres intégrales.

La comparaison entre le résultat du calcul hydrogénéoïde et du calcul avec corrélations met en évidence un accord excellent et confirme le fait que le facteur g'_s est assez peu sensible aux corrélations; cet accord ne permet toutefois pas clairement d'affirmer que les incertitudes sur les intégrales radiales sont très largement surestimées, si ce n'est éventuellement celles sur R_1, R_2, R_3, R_4 (ce que corrobore la comparaison avec les calculs de ACCAD et al. (51)); en tout état de cause, une telle conclusion ne permet pas de diminuer l'incertitude sur g'_L et g'_x qui, au contraire de g'_s , ne sont pas essentiellement sensibles aux intégrales d'énergies. Cette constatation jette d'ailleurs un doute sur l'incertitude à attribuer dans le calcul avec corrélations de M. LEWIS aux valeurs de g'_L et de g'_x .

Les résultats numériques concernant les intégrales radiales de l'effet diamagnétique sont reportés dans le tableau III-6. Nous y présentons successivement les résultats de l'approximation hydrogénéoïde avec blindage partiel et total. Puis, pour avoir une idée de l'influence des corrélations dans le niveau $n = 2$, nous avons calculé les deux parties de l'interaction sur une petite séquence de fonctions de HYLLEAAS; le terme isotrope peut être comparé au résultat extrapolé de ACCAD et PEKERIS (51); malheureusement, ces auteurs n'ont pas calculé les intégrales radiales correspondant à la partie tensorielle de l'effet (qui est en fait la seule qui compte dans notre problème).

Dans le cas du niveau $n = 2$, il semble raisonnable de prendre comme valeur numérique le résultat du calcul hydrogénéoïde avec blindage partiel en lui assignant une incertitude de 10%. Pour les niveaux $n = 3$ et 4, dans la mesure où l'intégrale R_{14} (valeur moyenne du carré du rayon de l'orbite

TABLEAU III-6

Effet Diamagnétique

| | | partie isotrope $S^0 = (R_{14} + R_{15})$ (unités a_0^2) | partie anisotrope $\hat{S}^2 = R_{15}$ (unités a_0^2) |
|------------------|--|---|--|
| 2 ³ P | approximation hydrogénéoïde $Z_1 = 1,99 \quad Z_2 = 1,09$ | 26,01 | 25,25 |
| | approximation hydrogénéoïde avec blindage total $Z_1 = 2 \quad Z_2 = 1$ | 30,75 | 30 |
| | HYLLERAAS 1 fn 2 fns 4 fns | 17,28 17,45 22,17 | 16,71 16,71 21,32 |
| | ACCAD, PEKERIS (⁵¹) | 26,423 | |
| | val. exp. (forces d'oscillateur) | | 26 |
| 3 ³ P | approximation hydrogénéoïde | 180,75 | 180 |
| | ACCAD, PEKERIS | 164. | |
| | val. exp. (forces d'oscillateur) | | 165.2 |
| 4 ³ P | approximation hydrogénéoïde | 600.75 | 600 |
| | ACCAD, PEKERIS (⁵¹) | 560. | |
| | forces d'oscillateur MILLER et FREUND (⁵²) | | 558 732 ± 118 |

de l'électron interne) varie certainement très peu avec n , $R_{14} \ll R_{15}$ et le résultat d'ACCAD et PEKERIS doit vraisemblablement donner une très bonne approximation de R_{15} ; nous lui avons attribué une incertitude de 20%.

c) Comparaison des intégrales radiales de l'effet diamagnétique avec divers résultats expérimentaux

Diverses confirmations expérimentales de ces résultats peuvent être examinées :

La première, relativement directe, provient des expériences de résonance magnétique de MILLER et FREUND (⁵²); l'examen du tableau III-6 montre un désaccord assez important entre ce résultat expérimental et les divers résultats de calcul (compte tenu des marges d'incertitudes, ces résultats restent cependant compatibles).

La deuxième confirmation est plus indirecte : elle repose sur l'étude des forces d'oscillateurs. Rappelons la définition (en unités atomiques) de la force d'oscillateur $f_{aa'}$, d'une transition en absorption ($a \rightarrow a'$) :

$$f_{aa'} = \frac{2}{3} (E_{a'} - E_a) \frac{|\langle a' | \vec{r}_a | a \rangle|^2}{2j_a + 1} \quad (\text{III-26})$$

En effectuant la sommation sur tous les états a' du spectre, il vient :

$$\langle a | r^2 | a \rangle = \frac{3}{2} \sum \frac{f_{aa'}}{E_{a'} - E_a} \quad (\text{III-27})$$

L'utilisation de la relation (III-27) et des valeurs des forces d'oscillateurs compilées dans la classification du N.B.S. (⁵³) conduit aux valeurs de l'intégrale R_{15} consignées dans le tableau III-6. On constate un accord très satisfaisant avec les résultats du calcul de ACCAD et PEKERIS (⁵¹).

d) Ordre de grandeur des termes négligés

Tout au long de cet exposé qui nous a conduit aux déterminations des facteurs de Landé du tableau III-5, nous avons été amenés à négliger un certain nombre de termes qu'il nous semble utile de récapituler maintenant pour préciser leur ordre de grandeur.

- les termes en $\alpha^3 \mu_B H$

Grâce aux formules donnant g'_s et g'_x données en (III-15) et (III-16), il est aisé de calculer les corrections d'ordre α^3 dues au moment anormal de l'électron; on trouve :

$$\delta g'_s = 0,1 \text{ ppm}$$

$$\delta g'_x < 0,1 \text{ ppm}$$

Toutefois, comme nous le rappelons dans le chapitre I-A-b, l'introduction du moment anormal ne permet pas de tenir compte de l'ensemble des corrections radiatives; il y a en particulier lieu de tenir compte d'effets de type Lamb-shift et d'effets de retard qui donnent par perturbation du second ordre une correction explicitée en (I-17).

Cette série, dont la convergence est lente, ($\log \frac{m}{2\Delta E}$), semble assez difficile à sommer; toutefois les premiers termes calculés sont de l'ordre ou très inférieurs à $10^{-8} \mu_B H$.

- les termes en $\alpha^4 \mu_B H$

Les termes d'ordre $\alpha^4 \mu_B H$ négligés dans ce travail ont de nombreuses origines : ils peuvent provenir des opérateurs en $\alpha^4 \mu_B H$ que nous n'avons pas calculés, des termes non diagonaux des corrections en $\alpha^2 \mu_B H$ (remarque n° 1, page 65), ou des termes croisés liés à la contamination des états 3P par l'intermédiaire du hamiltonien de structure fine (remarque n°2, page 65). Pour ce qui est de la première catégorie de ces termes, il y a tout lieu de penser qu'ils seront de l'ordre de 10^{-4} fois plus faibles que les termes issus de h_1 ($\alpha^2 \mu_B H$) et donc complètement négligeables (l'étude comparée de la valeur moyenne des opérateurs en $\alpha^6 mc^2$ par rapport à ceux en $\alpha^4 mc^2$ (7) nous confortant dans cette hypothèse).

L'examen des termes non diagonaux des corrections en α^2 (tableau III-2) conduit à des estimations qui sont au plus de l'ordre de $5 \cdot 10^{-8} \mu_B H$. La troisième catégorie de termes liés à la contamination des états 3P apporte la plus grosse correction : elle apparaît au 3ème ordre de perturbation sous la forme :

$$\sum_{n,S,L} \frac{|\langle 2^3P | \mathcal{H}_{SF} | n^S L \rangle|^2 + |\langle n^S L | \mathcal{H}_{Zee} | n^S L \rangle|^2}{E_{2^3P} - E_{n^S L}}$$

La contribution essentielle à cette somme provient du 2^1P qui n'est qu'à 2000 cm^{-1} du 2^3P : elle est de l'ordre de $2.5 \times 10^{-7} \mu_B H$. Tous les autres termes sont au moins 100 fois plus faibles.

En conclusion, il apparaît donc que tous les termes négligés sont inférieurs ou égaux à quelques $10^{-7} \mu_B H$ (la plus importante étant celle liée au mélange triplet-singlet). Nous pensons donc que les résultats rassemblés dans le tableau III-5 concernant les calculs de g'_s sur un base de HILLERAAS sont vraisemblablement valables au ppm ou mieux (on doit d'ailleurs noter à cet égard l'excellent accord avec les résultats expérimentaux récents de E. AYGÜN et al. (54)). En ce qui concerne les résultats pour g'_L et g'_s , il est plus difficile d'être affirmatif comme nous l'expliquions dans le paragraphe b, car ces deux facteurs sont peu sensibles à la qualité de la fonction d'onde à courte distance, mais très sensibles à tous les effets à longue distance et aux effets de corrélations. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce point à l'occasion de la confrontation de l'ensemble des résultats expérimentaux (les nôtres et ceux de S.A. LEWIS (46)) que nous ferons dans le prochain chapitre.

CHAPITRE IV

EFFET ZEEMAN DES NIVEAUX 3P DE L'HELIUM. RESULTATS EXPERIMENTAUX

Les résultats des chapitres précédents ont montré l'intérêt des mesures de grande précision de l'effet Zeeman des atomes à plusieurs électrons comme test de l'électrodynamique quantique et de ses diverses approximations; mais ils ont laissé dans l'ombre l'une des raisons essentielles qui justifient le travail tant théorique qu'expérimental investi plus particulièrement sur l'atome d'hélium : la durée de vie de l'hélium dans les premiers niveaux 3P , qui est de l'ordre de 100 ns, soit environ 60 fois plus longue que celle de l'hydrogène dans le niveau 2^2P , offre la possibilité de mesures d'une très grande précision.

L'expérience que nous avons réalisée, utilisant la technique maintenant classique des croisements de niveaux (⁵⁵), nous a permis de mesurer la position des trois croisements de niveaux $\Delta m = 2$ du diagramme Zeeman des multiplets 3P (croisements entourés d'un cercle sur la figure IV). Comme nous le soulignons dans le chapitre précédent, cette connaissance est insuffisante, pour déterminer l'ensemble des paramètres indépendants du problème (à savoir les intervalles de structure fine, les facteurs de Landé et le coefficient anisotrope de l'effet diamagnétique) et ce n'est qu'en fonction, et par rapport aux données expérimentales antérieures que l'on peut juger de l'intérêt de cette nouvelle expérience. Sans prétendre citer l'ensemble des travaux réalisés sur les niveaux 3P de l'hélium, nous avons récapitulé dans le tableau IV-1 l'essentiel des résultats les plus précis concernant les intervalles de structure fine obtenus par diverses méthodes expérimentales (mesures optiques, résonance magnétique, croisement de niveaux ...).

TABLEAU IV-1

Structures fines des niveaux n^3P (en MHz)

| | $^3P_0 - ^3P_2$ | $^3P_0 - ^3P_1$ | $^3P_1 - ^3P_2$ |
|---------|------------------|---------------------|--------------------|
| 2^3P | | 29640±300 (a) | 2291,72±0,36 (c) |
| | | 29650±280 (b) | 2291,56±0,09 (b) |
| | | 29616,76±0,40 (d) | 2291,200±0,022 (d) |
| | 31908,060±.041 | 29616,864±0,036 (e) | 2291,196±0,005 (f) |
| théorie | 31908,11±.32 (g) | 29616,83±0,11 (g) | 2291,28±0,21 (g) |
| 3^3P | | 8100.±16. (h) | 658,0±5,0 (j) |
| | 8772,33±0,37 | 8113,78±0,22 (c) | 658,55±0,15 (c) |
| | 8772,55±0,13 (n) | 8113,75±0,31 (i) | |
| théorie | 8772,5 (k) | | |
| 4^3P | | 3500.±500. (l) | 269,0±0,1 (l) |
| | 3576,8±1.4 (m) | 3306,4±0,7 (m) | 270,4±0,7 (m) |
| | 3576,48±0,10 (n) | 3305,72±0,28 (i) | |
| théorie | 3576,5 (k) | | |

a) BROCHARD (J) : J. de Phys. et le Radium, 1952, 13, 433

b) COLEGROVE (F.D), FRANKEN (P.A), LEWIS (R.R), SANDS (R.H) : Phys. Rev. Letters, 1959, 3, 420

c) WIEDER (I), LAMB (W.E) : Phys. Rev. 1957, 107, 125

d) LIFSHITZ (J), SANDS (R.H) : Bull. Am. Phys. Soc. 1965, 10, 1214

e) KPONOU (A), HUGHES (V.W.), JOHNSON (C.E), LEWIS (S.A), PICHANICK (F.M.J) : Phys. Rev. Letters, 1971, 26, 1613

f) LEWIS (S.A), PICHANICK (F.M.J), HUGHES (V.W.) : Phys. Rev. 1970, 2, 86

g) M.L. LEWIS in Proceedings of the Fourth International Conference on Atomic Physics, 1974, Heidelberg, Germany, edited by Z. zu PUTLITZ, E.W. WEBER A. WINNACKER (Plenum Press, London-New York, 1975)

h) WITTMANN (W), TILLMANN (K), ANDRÄ (H.J), DOBBERSTEIN (P) : Zeit. Phys. 1972, 257, 279

i) KAUL (R.D) : J. Opt. Soc. Am. 1967, 57, 1156

j) BERRY (H.G), SUBTIL (J.L), CARRÉ (M) : J. de Phys. 1972, 33, 947

k) ACCAD (Y), PEKERIS (C.L), SCHIFF (B) : Phys. Rev. 1971, 4, 516

l) DESCOUBES (J.P.) : Thèse, Paris, 1967

m) MILLER (T.A), FREUND (R.S) : Phys. Rev. 1972, 5, 588

n) nos résultats

Sans entrer dans un commentaire détaillé de l'ensemble de ces résultats, il importe de noter que c'est la finesse des raies de l'hélium dans le niveau 2^3P qui a permis la détermination au ppm près des intervalles de structure fine de ce multiplet (les résultats des expériences réalisées au Gibbs Laboratory de Yale sous la direction de V.W. HUGHES ont été publiés dans les références (3)(4)(56)). C'est d'ailleurs cette éventualité qui a motivé le programme de travail entrepris dès 1964 par C. SCHWARTZ (42), développé ensuite par HAMBRO (30), KROLL et al. (1)(2), le but commun à l'ensemble de ces travaux étant non seulement un test de la théorie, mais encore la détermination de α au ppm ou mieux. La confrontation des résultats expérimentaux et théoriques actuels conduit à une valeur de α entachée d'une incertitude de 2 ppm (57), ce qui en fait la meilleure détermination de α en physique atomique. Du fait de cette situation, la connaissance numérique des fonctions d'onde de l'hélium est très en avance sur celle des autres atomes à plusieurs électrons, ce qui a permis à M. LEWIS (47) de donner une détermination numérique des facteurs de Landé de l'hélium dans le niveau 2^3P présumée valable au ppm près (voir chap. III-D-b). Tous les éléments sont donc en place pour la comparaison à quelques ppm près des résultats théoriques et expérimentaux sur l'effet Zeeman de l'hélium dans les niveaux 2^3P . A ce stade, nous devons rappeler que des mesures de très grande précision ont déjà été réalisées dans le niveau 2^3S (8)(9); les plus récentes (9) présentent un excellent accord avec la théorie. L'intérêt de l'étude dans le niveau 2^3P réside donc plus particulièrement dans le test des termes dépendant du moment orbital (g'_L essentiellement); comme nous le verrons dans ce chapitre, l'expérience que nous avons réalisée est particulièrement sensible à ce paramètre, ce qui nous a permis de diminuer notablement la barre d'incertitude de la détermination expérimentale faite à Yale par S.A. LEWIS et al. (7) par une autre méthode.

Dans les niveaux $n = 3$ et 4 , la situation est assez différente : la précision des déterminations antérieures des structures fines est beaucoup plus faible (au mieux quelques 10^{-5}) et il n'y a aucune mesure de précision des facteurs de Landé : c'est grâce au calcul de ces facteurs (réalisé dans le chapitre précédent) que nous avons pu améliorer la connaissance expérimentale du grand intervalle de structure fine et sur ce point encore une confrontation avec des résultats théoriques récents (ACCAD PEKERIS (51)) est possible.

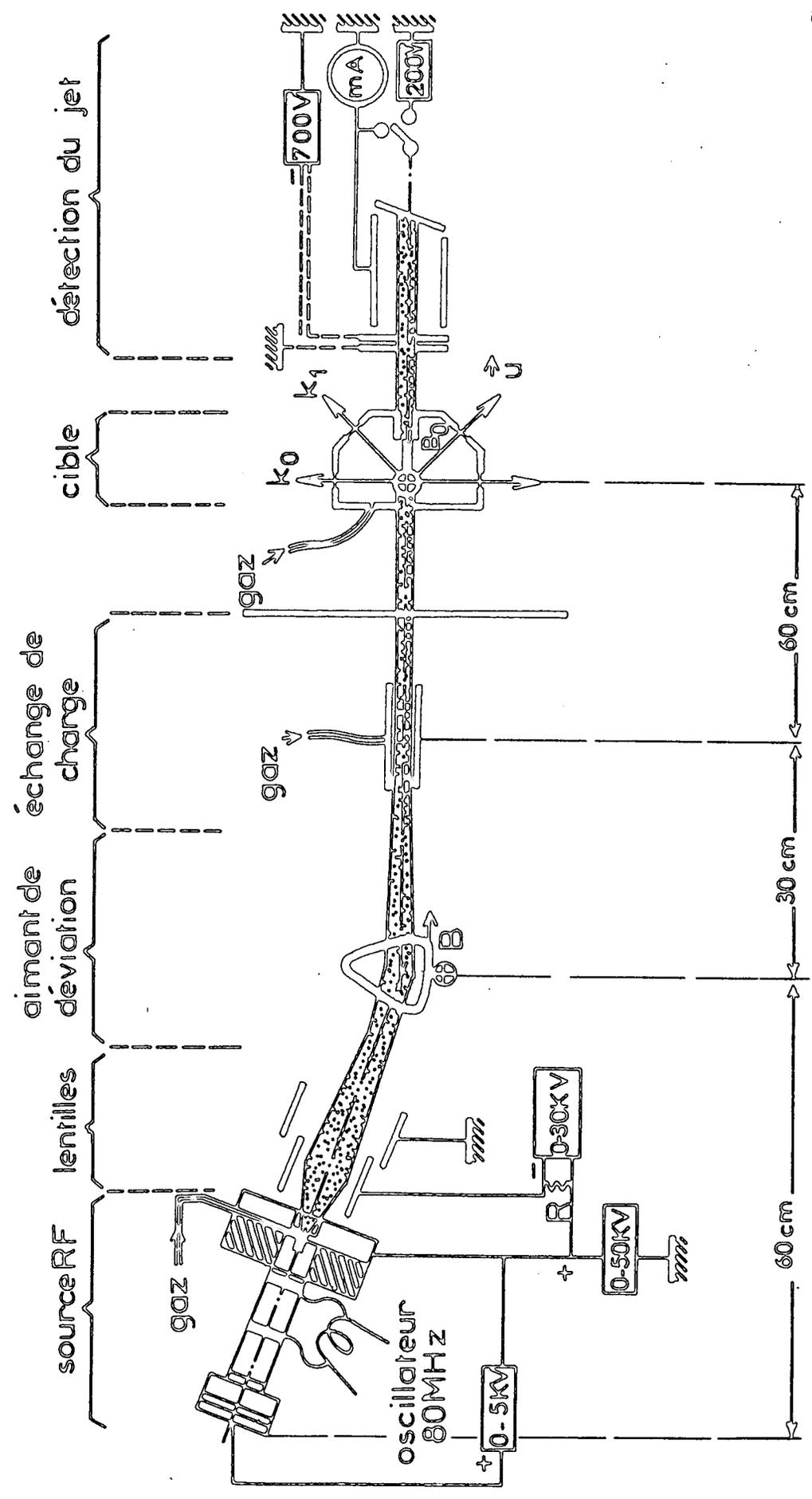


Fig - V

Le principe de l'expérience que nous avons réalisée est extrêmement simple puisqu'il s'agit d'une expérience de croisement de niveaux dont la seule originalité est l'excitation par bombardement atomique. Dans le cadre de ce chapitre, nous ne reviendrons ni sur les avantages et les limitations fondamentales d'une telle méthode (qui ont été amplement discutés dans l'introduction), ni sur ses multiples aspects technologiques qui feront l'objet d'un chapitre séparé; mais nous mettrons l'accent sur la recherche expérimentale de la précision optimale (§ A), la discussion d'erreurs systématiques éventuelles (§ B) et enfin les résultats numériques obtenus concernant soit les facteurs de Landé, soit les structures fines (§ C). Dans une certaine mesure, le contenu du paragraphe A recoupe celui du chapitre V sur les techniques expérimentales, il nous a toutefois semblé intéressant de reprendre très rapidement le principe général de l'expérience tout en isolant les divers points expérimentaux délicats, spécifiques à cette expérience sur l'hélium, afin de mener de façon rapide mais complète la discussion sur les incertitudes entachant nos mesures. Cela ne doit pas minimiser l'importance de certains aspects technologiques (concernant en particulier la source d'ions) qui ont été des paramètres essentiels de la réalisation de cette expérience et qui seront développés dans le chapitre V .

A. Principe de l'expérience et problèmes spécifiques liés à la mesure du champ magnétique

a) Principe de l'expérience et schéma d'ensemble

L'excitation cohérente nécessaire à la mise en évidence des croisements de niveaux est réalisée par bombardement de la cible d'hélium par les atomes neutres d'un jet perpendiculaire au champ magnétique (cf schéma d'ensemble de la figure V et schéma de la cellule de collision figure VI). L'excitation créée par le jet a globalement la symétrie de révolution autour de son axe; elle est susceptible d'introduire dans la vapeur un alignement le long de cet axe Ox . Pour des raisons d'encombrement géométrique, nous n'avons pu étudier jusqu'ici que la configuration où le champ magnétique est perpendiculaire à l'excitation (perpendiculaire au plan de la coupe de la figure V). Dans cette situation, seuls les sous-niveaux tels que $\Delta m = 2$ sont excités de manière cohérente; nous avons entouré d'un cercle sur le diagramme Zeeman de la figure IV

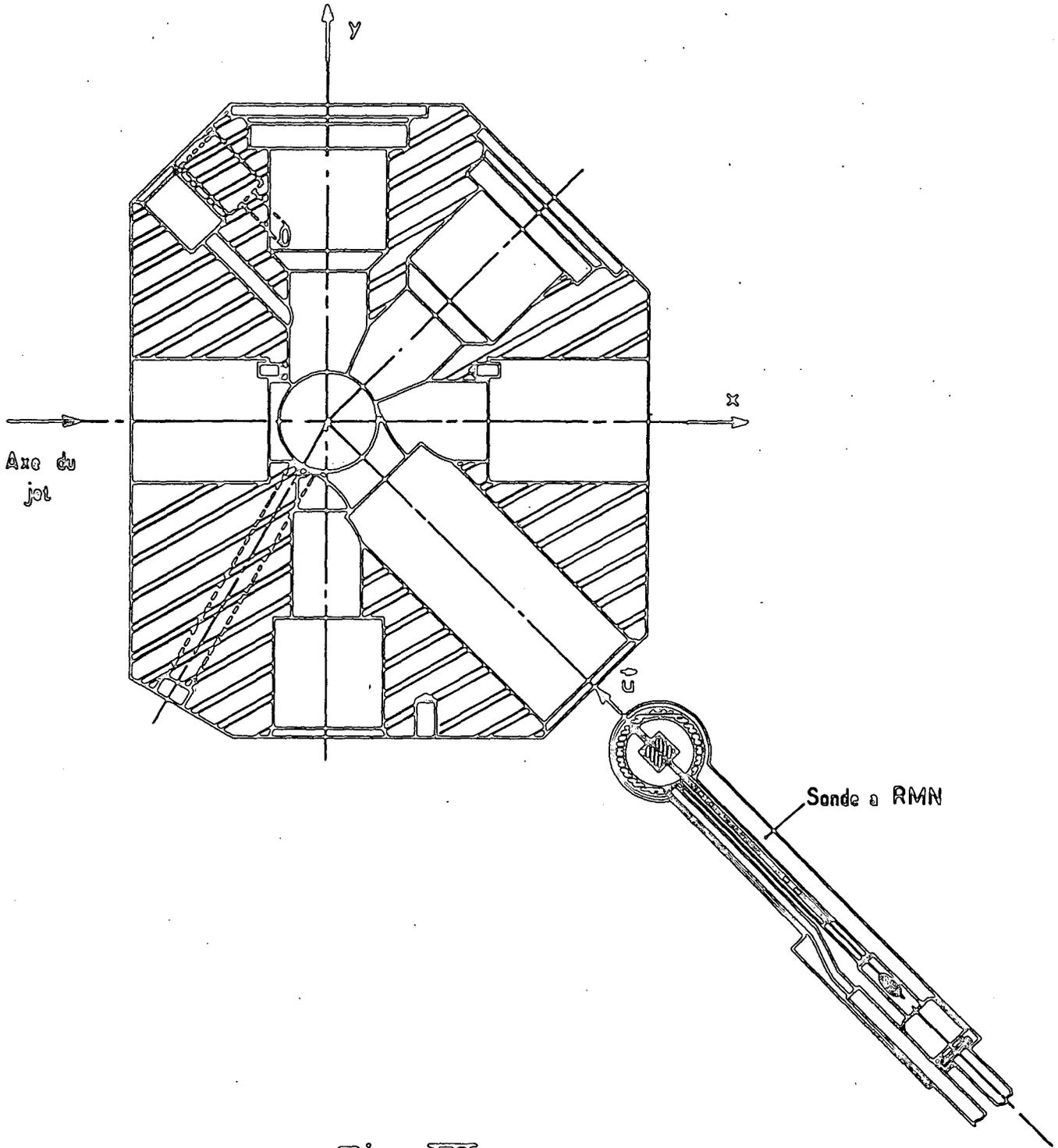


Fig VI

les croisements susceptibles d'être mesurés avec notre montage. La forme des signaux observables sur la lumière de fluorescence est alors donnée par l'expression (58) :

$$I \propto \left[\frac{\Gamma}{\Gamma^2 + \left(\frac{\Delta E}{\hbar}\right)^2} \cos 2\chi + \frac{\frac{\Delta E}{\hbar}}{\Gamma^2 + \left(\frac{\Delta E}{\hbar}\right)^2} \sin 2\chi \right] \sin^2 \phi \quad (\text{IV-1})$$

où Γ représente la largeur naturelle du niveau envisagé,

ϕ l'angle de la polarisation détectée avec le champ magnétique,

χ l'angle de la direction d'observation avec le jet incident,

$\Delta E = E_1 - E_2$ la différence d'énergie des sous-niveaux Zeeman qui se croisent.

Dans la mesure où l'énergie des niveaux au voisinage du point de croisement est une fonction linéaire du champ, la courbe de résonance apparaît soit comme une courbe d'absorption (observation à 90°), soit comme une courbe de dispersion (observation à 45°).

Le signal de fluorescence de la zone d'interaction du jet avec la cible (cylindre de diamètre 3 mm et de 10 mm de long), recueilli à 45° ou 90° de la direction d'excitation, est transporté jusqu'au photomultiplicateur situé loin de l'influence de l'aimant grâce à un faisceau de fibres optiques.

Comme le montre la formule (IV-1), l'observation du signal peut se faire directement sur la lumière de fluorescence. Toutefois, on améliore le rapport signal/bruit en détectant un signal modulé soit par un polariseur tournant, soit par une modulation du champ réalisé grâce à deux petites bobines internes à la cellule (dans ce dernier cas, nous avons tenu compte de l'amplitude finie de la modulation dans le programme utilisé pour dépouiller numériquement les données expérimentales).

Compte tenu des faibles taux de polarisation observés, l'obtention d'une résonance avec un rapport signal/bruit de l'ordre de 60 nécessite deux heures de moyennage (sur le 2^3P). Le problème délicat de l'étalonnage absolu du champ se trouve donc compliqué par la nécessité d'un repérage permanent et précis de ce champ.

b) Le champ magnétique

Le champ magnétique est créé par un électroaimant à entrefer variable. Pour obtenir les résultats présentés ici, nous avons travaillé avec un entrefer de 5 cm (le diamètre des pièces polaires, anneaux de garde exclus, est de 20 cm). Après une procédure d'homogénéisation assez délicate (décrite dans le chap. V, § C-a), les réglages optimaux obtenus permettent d'annuler les gradients de champs sur la zone d'observation à mieux de 1 ppm ($\frac{\Delta H}{H} < 10^{-6}$). Cependant, une fois la cellule et toute l'optique mises en place, nous avons constaté une déformation des lignes de champ (malgré une sélection aussi rigoureuse que possible des matériaux métalliques utilisés : essentiellement duralinox); c'est ainsi qu'à 8280 G, à l'intérieur de la cellule, les inhomogénéités atteignent 1,5 ppm sur la zone observée.

L'alimentation de l'aimant est réglée et balayée grâce à un dispositif à effet Hall qui assure une stabilité à court terme de 10^{-5} au moins en bas champ à ± 10 mG environ en fort champ. L'élimination des dérives lentes lors de l'acquisition des données a été réalisée par repérage permanent du champ magnétique grâce au gaussmètre à résonance nucléaire extérieur à la cellule (la technique utilisée est décrite dans le paragraphe C : acquisition des données). La mesure du champ a également été faite à l'aide de divers gaussmètres à RMN dont les échantillons peuvent prendre exactement (à mieux 5/10 mm près) la position de la zone d'interaction du jet et de la cible soit par coulissement dans la direction $O\vec{U}$, soit dans la direction verticale $O\vec{Y}$. Les problèmes liés à la mesure in situ du champ et aux inhomogénéités étant ainsi maîtrisés, nous avons été confrontés à des problèmes encore plus sérieux concernant la mesure en valeur absolue du champ au niveau de précision souhaité.

c) Gaussmètre à résonance magnétique nucléaire

Le premier gaussmètre utilisé pour mesurer le champ magnétique dans les expériences préliminaires était un gaussmètre à oscillateur marginal classique (A.E.G.). Sans entrer dans l'analyse détaillée de la théorie des signaux de résonance de ce type d'appareil (voir chapitre V, § C-b) nous pouvons simplement en rapporter les conclusions qui nous ont prouvé qu'en dépit d'affirmations trop courantes, ce montage est sensible non seulement à χ'' (partie imaginaire de la susceptibilité nucléaire liée à l'absorption), mais également à χ' (partie réelle liée à la dispersion). Ce mélange absorption-dispersion explique que nous ayons mesuré avec certaines sondes des shifts de

la résonance de l'ordre du 1/5 de sa largeur, soit 60 mG ^{☆)}. Dans la mesure où l'appareil A.E.G. fonctionne à saturation, les équations de la résonance nucléaire dans les régimes transitoires (qui sont le mode de fonctionnement normal des oscillateurs marginaux) sont très délicates à résoudre et il était donc impossible de faire a priori une correction numérique de l'erreur introduite par le mélange absorption-dispersion. Nous avons donc abandonné cet appareil pour nos étalonnages du champ magnétique et recherché d'autres types de gaussmètre ne présentant pas ce défaut.

Pour la gamme de champ de 500 à 2300 G, nous avons utilisé un gaussmètre RMN à pont de type Bloembergen ⁽⁶⁰⁾ (largeur de raie de l'ordre de 50 mG), aimablement prêté par E. GIACOBINO, puis, pour couvrir une plus grande gamme de fréquences et de champs (jusqu'à 18000 G), nous avons réalisé un oscillateur marginal oscillant à très bas niveau (quelques mV) selon les plans de J.R. ANDERSON et al. ⁽⁶¹⁾, oscillateur dont nous donnons le schéma dans le chapitre V. La largeur des raies observées est alors très faible. Nous avons mesuré sur l'eau faiblement dopée ($\text{FeCl}_3 \sim \frac{N}{100}$) des largeurs de raies de résonance de l'ordre de 10 mG; toutefois, pour obtenir des temps de réponse du système plus compatibles avec les vitesses de balayage utilisées dans la mesure des croisements de niveaux, nous avons utilisé des échantillons légèrement plus dopés présentant des largeurs de raies typiques de l'ordre de 20 mG (fig. VII). Dans ces conditions et compte tenu du facteur de qualité du circuit, le mélange absorption-dispersion n'est plus décelable sur la forme de la résonance et nous pensons que le centre de la raie peut être pointé avec une incertitude inférieure ou égale à 2 mG. Les repères d'étalonnage du balayage du champ magnétique ont été obtenus à fréquence fixe en synchronisant l'autooscillateur sur un synthétiseur à quartz de stabilité supérieure à 10^{-7} récemment recalibré. A l'aide de ce système, nous avons pu vérifier que les inhomogénéités au niveau de la zone d'interaction du jet et de la cible étaient bien inférieures ou égales à 10 mG pour les mesures en bas champ, et égales à 12 mG pour les mesures à 8280 G; que la linéarité du balayage était de l'ordre de $5 \cdot 10^{-4}$ et que les fluctuations du champ à court terme étaient inférieures ou au plus égales à 10 mG.

☆) *Ce fait explique les erreurs systématiques entachant nos résultats préliminaires ⁽⁵⁹⁾.*

Intensité

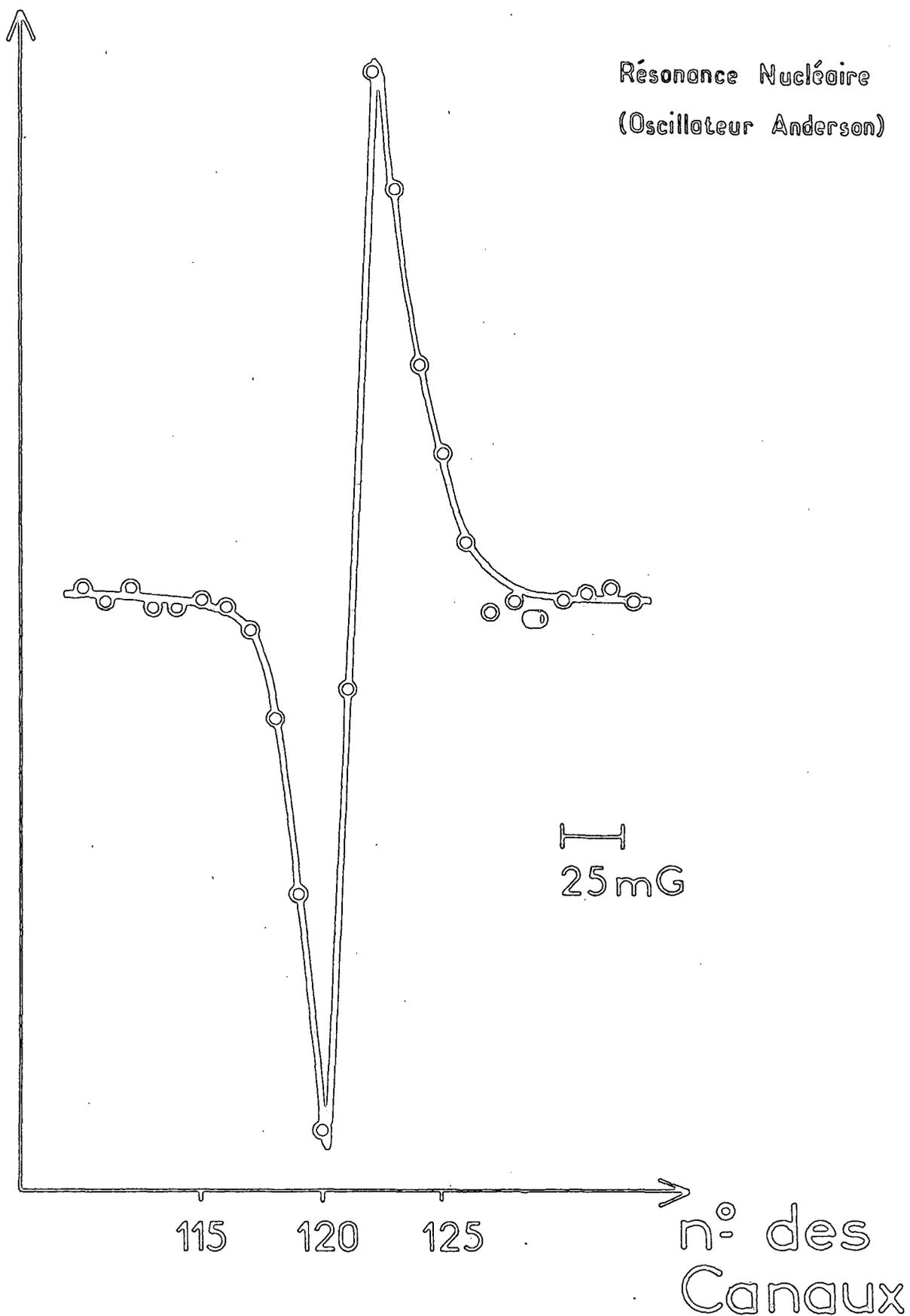


Fig. VII

Pour passer de la valeur de la fréquence de résonance des protons dans l'eau aux fréquences atomiques, nous avons utilisé le rapport :

$$\frac{\mu_P'}{\mu_B} = 1.520\ 993\ 12 \times 10^{-3} \pm 1.10^{-10}$$

valeur recommandée dans le dernier ajustement des constantes physiques du N.B.S. (B.N. TAYLOR et al. (62)).

Un certain nombre de corrections (diamagnétisme de volume, effet des ions paramagnétiques ...), négligeables devant la précision des mesures pour les mesures en bas champ, ont été étudiées en détail pour le croisement en fort champ du niveau 2^3P : nous en faisons la revue dans le paragraphe B.

d) Acquisition des données

L'obtention d'une résonance avec un rapport signal sur bruit typique des figures IX (~ 60) nécessite environ deux heures de moyennage pour les résonances sur les niveaux 2^3P . Pour ne pas perdre en précision sur le pointé du champ magnétique, il nous fallait donc éliminer ou corriger les dérives lentes de la stabilisation à effet Hall de l'aimant. Cette dérive qui peut atteindre 50 à 100 mG sur deux heures est liée essentiellement à la variation de température de la salle d'expérience.

Nous avons adopté en conséquence un mode d'acquisition des données qui est schématisé sur la figure VIII^{☆)}. Le gaussmètre à R.M.N. à sonde fixe extérieure à la cellule est asservi à une fréquence $\nu_0 = \gamma H_0$ fixée à l'avance (à ± 10 Hz près). Le champ est balayé linéairement en dents de scie grâce à la régulation à effet Hall et ceci sur une amplitude légèrement supérieure à celle utile (courbe en pointillé sur la figure IX). C'est le signal de résonance nucléaire à H_0 qui, à l'instant t_0 , déclenche le démarrage de l'avance canal du moyenneur et le stockage. Le comptage d'un nombre prédéterminé de canaux, c'est-à-dire d'un intervalle de temps $t_1 - t_0 = \tau$ constant, commande l'inversion du balayage du champ. Le stockage est poursuivi jusqu'au temps t_2 (tel que $t_2 - t_1 = \tau$); le balayage du champ continue dans le même sens jusqu'au point de renversement automatique I, le stockage des données reprend, commandé

☆)

La description détaillée des divers systèmes électroniques utilisés pour réaliser un tel cycle d'acquisition de données est reportée au chapitre V § C.

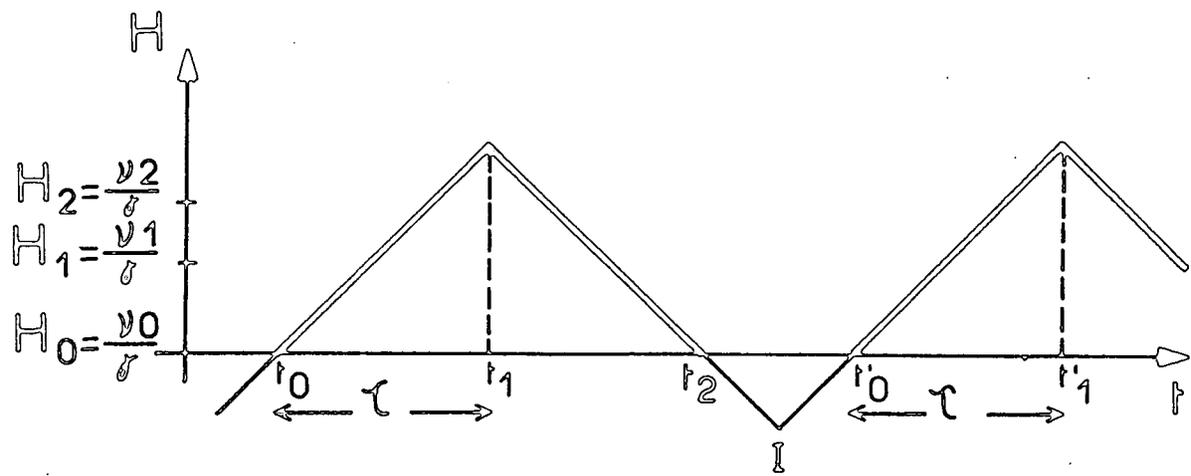
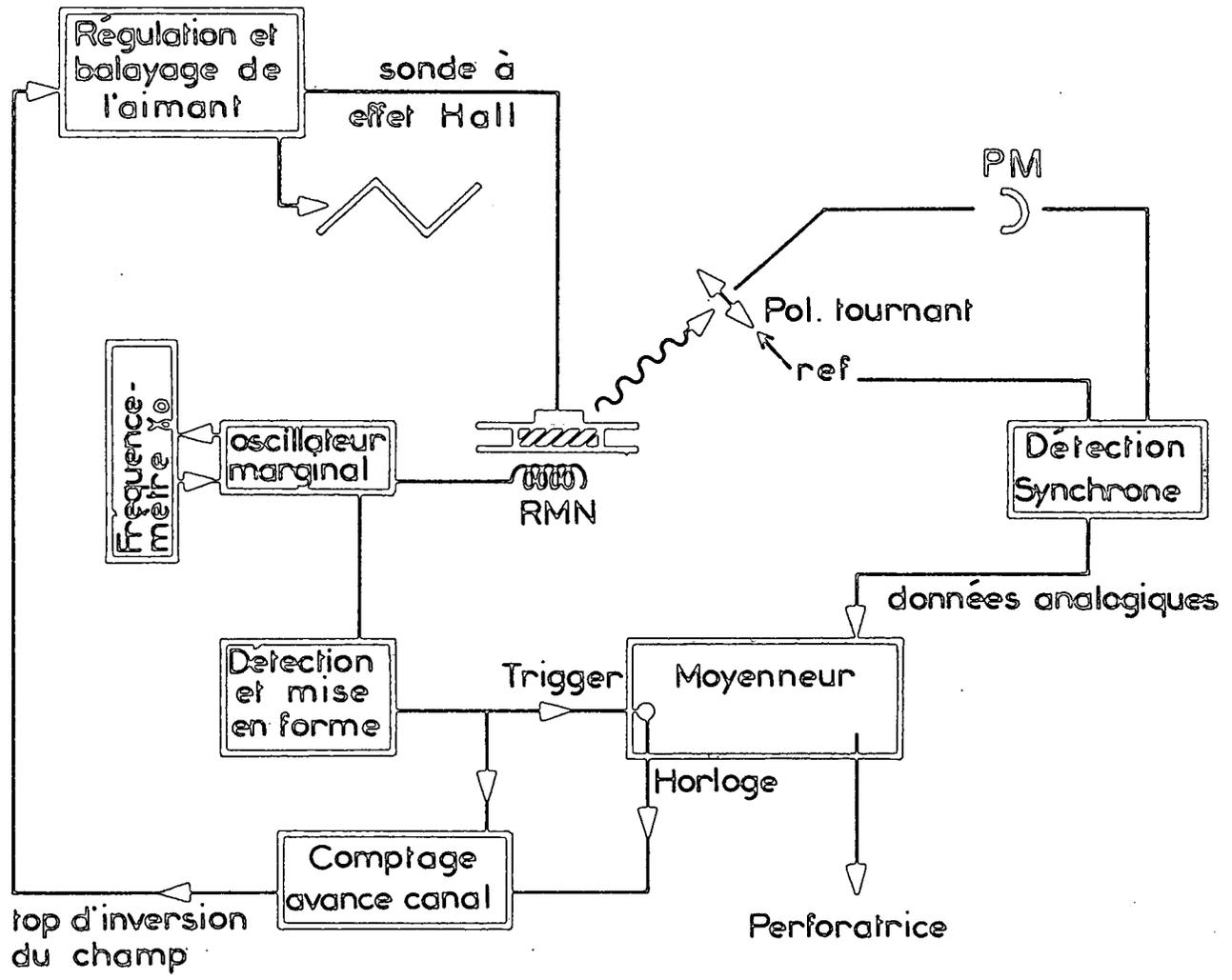


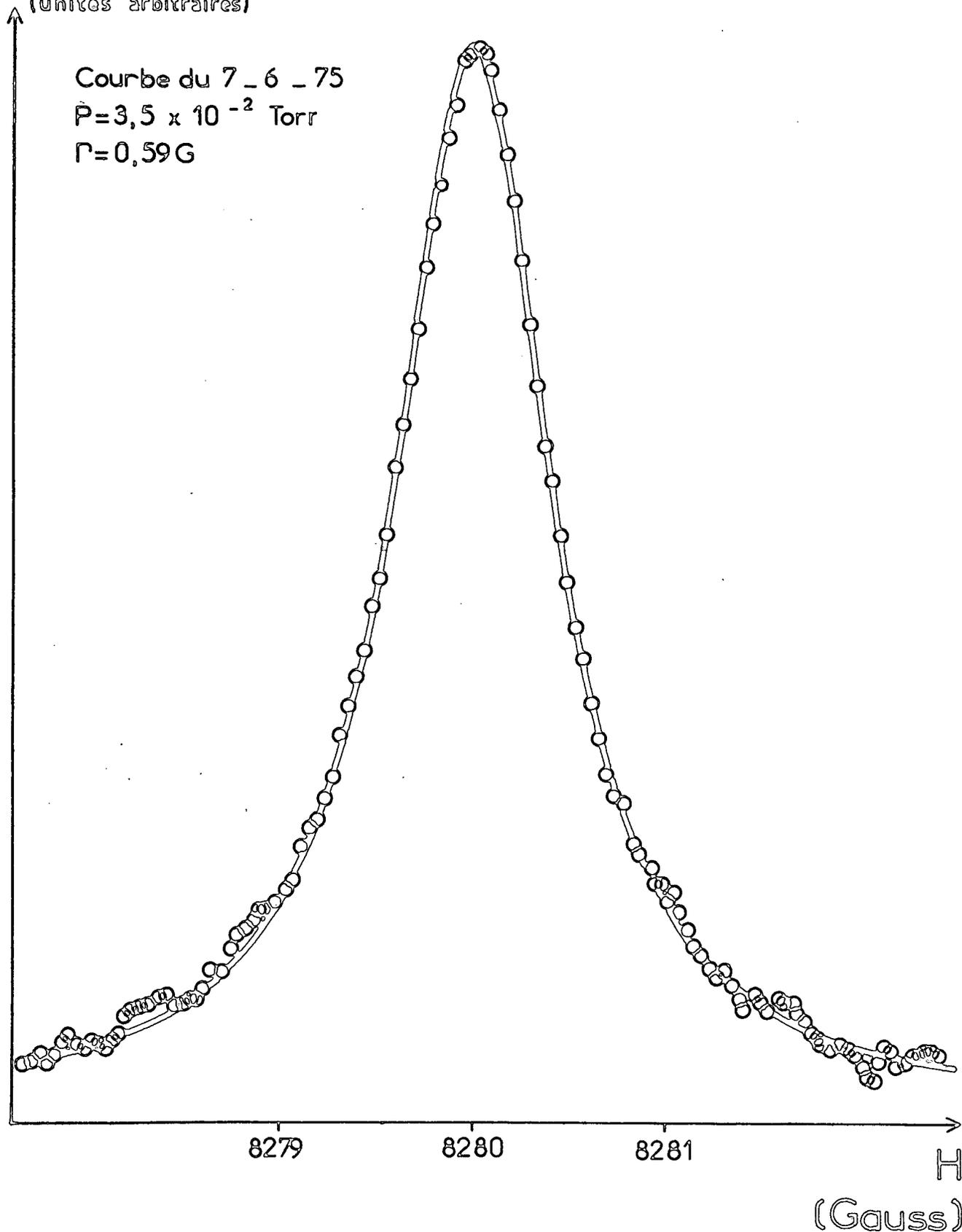
Fig. VIII

par la R.M.N., au temps t'_0 ($H(t'_0) = H_0$) dans le canal numéro 1. Les signaux des divers balayages s'accumulent ainsi sans décalage; après un nombre de passages suffisant, le signal stocké est transféré sur bande de papier pour être ensuite traité numériquement sur ordinateur en même temps que les données d'étalonnage. Les étalonnages sont faits avant et après chaque mesure de croisement de niveaux en plaçant, exactement à la place de la zone d'interaction du jet et de la cible, la cellule du gaussmètre à R.M.N. à raie étroite construit selon le schéma d'ANDERSON (⁶¹) décrit en b : les signaux de résonance nucléaire à des fréquences ν_1, ν_2, ν_3 sont alors enregistrés sur l'analyseur multicanaux dans les mêmes conditions que les courbes de croisement de niveaux (même balayage, même déclenchement sur la résonance de la sonde externe fixe). La comparaison de plusieurs étalonnages successifs montre des désaccords au plus égaux à 20 mG (à 8000 G), non systématiques, liés à des bruits à court terme. Après moyennage des quelques étalonnages faits avant et après l'expérience proprement dite, l'ajustement des résultats expérimentaux (une quinzaine de points d'étalonnage répartis sur l'ensemble du balayage) à une dent de scie symétrique fait apparaître une erreur quadratique moyenne de l'ordre de 5 mG. Aucun effet systématique n'apparaît à la comparaison des résultats de plusieurs jours d'expérience.

L'étalonnage des canaux étant ainsi obtenu, le traitement numérique des signaux de croisement consiste à ajuster les courbes expérimentales, soit avec une lorentzienne (fig. IX -a), soit avec une courbe de dispersion ou une des courbes plus compliquées que l'on obtient par modulation du champ (ex. : fig. IX -b : observation à 45° du signal modulé); il est tenu compte des effets de retard dus aux constantes de temps de la détection et procédé à une recherche systématique d'asymétries. Aucune asymétrie systématique n'a été mise en évidence; les taux de dispersion dans les lorentziennes se sont toujours révélés inférieurs à 2% (en général de l'ordre de 0,5%) et de signe variable. Le rapport signal sur bruit typique des résonances sur le 2^3P est de 60 (pour deux heures de moyennage), mais il n'est plus que de 20 environ pour le 4^3P (taux de polarisation beaucoup plus faible).

Les 6 mesures effectuées sur le croisement en fort champ (8280 G) avec les techniques décrites ici et sur les différentes formes de signaux observables coïncident à 5 mG près (pour une largeur de raie de l'ordre de 500 mG à $2 \cdot 10^{-2}$ torr). Les autres mesures reportées dans ce travail, faites avec une technique un peu moins sophistiquée pour la mesure du champ, présentent une plage de dispersion de l'ordre de 20 à 30 mG (± 15 mG).

INTENSITÉ
(unités arbitraires)



Modulation de la polarisation (observation à 90°)

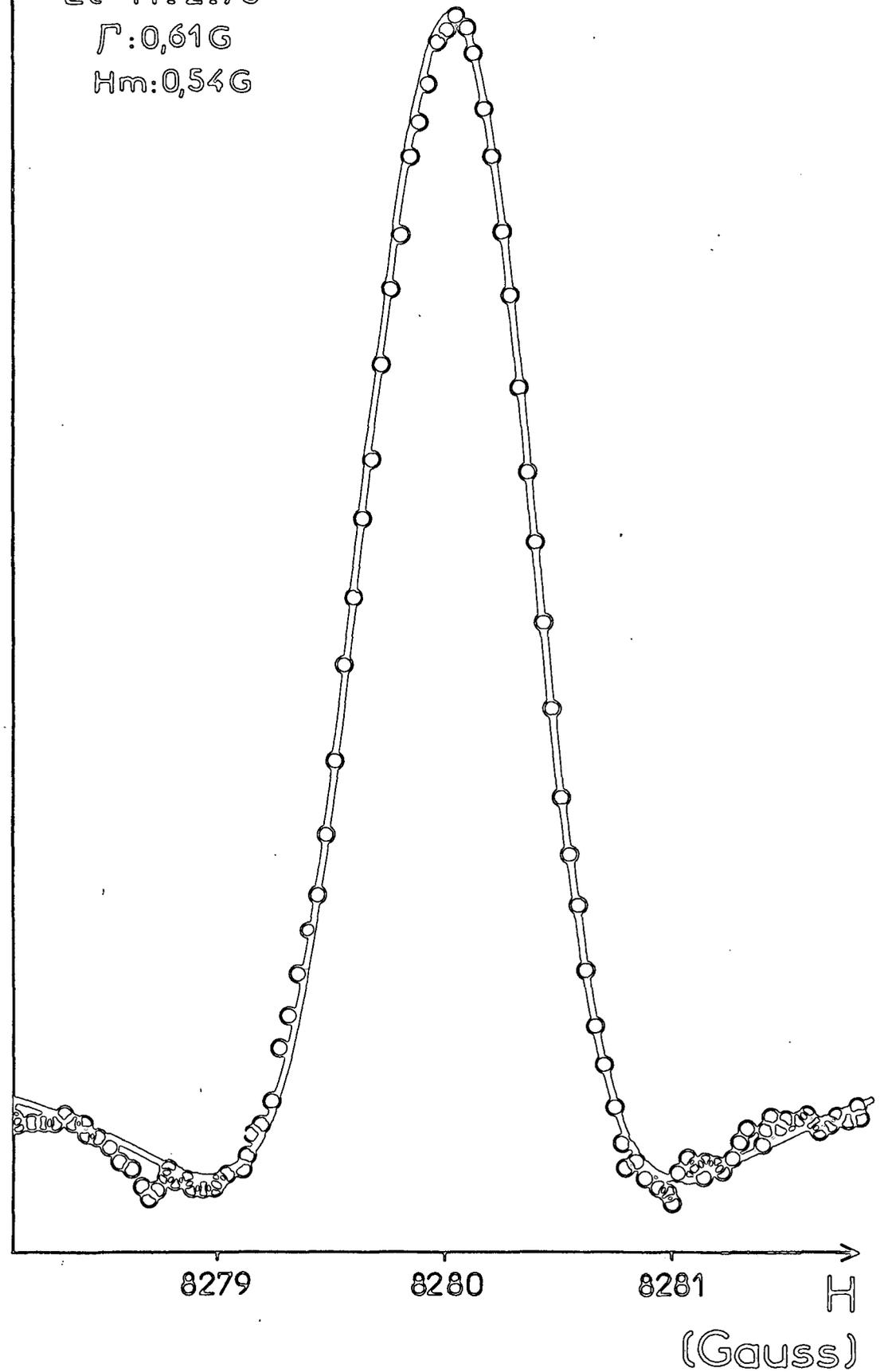
Fig. IX a

INTENSITE

Le 14.2.75

$\Gamma: 0,61G$

$H_m: 0,54G$



Modulation du champ (observation à 45°)

Fig. IX b

B. Erreurs systématiques. Discussion de quelques origines éventuelles

a) Mesure du champ

Les résultats bruts ainsi obtenus sont encore entachés de quelques erreurs systématiques liées à la mesure de la valeur absolue du champ. Ainsi, pour des raisons technologiques, nous n'avons pu réaliser une sonde de protons sphérique avec une bobine ayant exactement la forme du jet (diamètre et longueur). L'ampoule initiale (figure X-a), réalisée en téflon, est un cylindre tronqué de diamètre 6 mm et de longueur 10 mm, transverse par rapport au champ, qui contient une bobine de diamètre 3 mm et de longueur 5 mm (en fil de cuivre émaillé). Il en résulte deux conséquences essentielles :

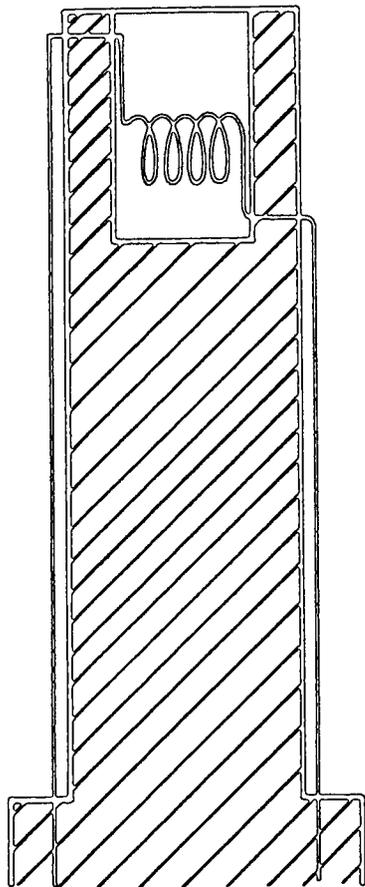
- . le champ moyen vu par les protons n'est pas exactement le même que celui moyen vu par les atomes excités par le jet (on observe en effet une zone du jet de 10 mm de long); d'où la nécessité d'une correction due aux inhomogénéités du champ sur cette longueur.
- . l'échantillon n'étant pas sphérique, il faudra tenir compte d'une correction diamagnétique de volume, à laquelle s'ajoutent celles dues aux modifications du champ local par les ions paramagnétiques.

Toutes ces corrections, de l'ordre de 1 ppm au plus, sont totalement négligeables devant les incertitudes expérimentales pour tous les résultats présentés dans le paragraphe C, excepté pour le croisement à 8280 G. L'ensemble des valeurs numériques que nous rapportons maintenant concernent donc exclusivement ce domaine de champ.

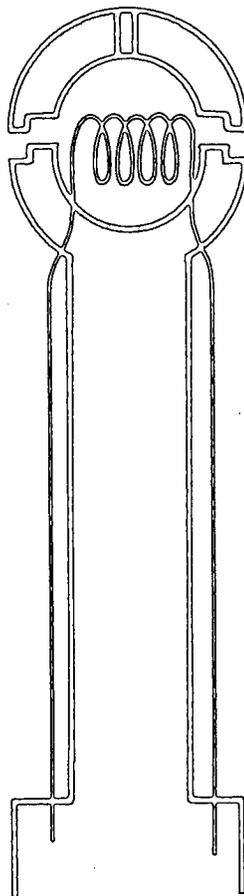
Pour mesurer le gradient du champ, nous avons translaté notre sonde RMN de 2,5 mm en 2,5 mm le long de l'axe du jet. L'existence de ces gradients implique que, dans nos résultats bruts, le champ moyen était surestimé de 10 mG d'où une correction $\Delta h_1 = -10 \text{ mG}$.

Comparant ensuite les résultats d'étalonnage donnés par notre sonde cylindrique aux résultats obtenus avec une sonde sphérique, de bobine identique (figure X), utilisant la même solution N/100 de nitrate ferrique, nous en avons déduit les corrections à ajouter à nos résultats bruts pour tenir compte de l'effet diamagnétique de volume $\Delta h_2 = -6 \text{ mG}$.

cylindre $\varnothing = 6\text{mm}$
 $l = 10\text{mm}$



sphère $\varnothing = 6\text{mm}$



bobine $\varnothing = 3\text{mm}$
 $l = 5\text{mm}$

Fig. X

A titre de comparaison, il est intéressant de reprendre la formule théorique du champ local dans les cas limites que l'on sait calculer. Suivant la méthode préconisée par DEBYE pour les diélectriques, on calcule le champ local au point P à l'intérieur d'un volume V, de magnétisation homogène \vec{M} , plongé dans un champ extérieur \vec{B}_0 en superposant le champ \vec{B}_1 créé par l'échantillon creusé d'une cavité sphérique en P, au champ \vec{B}_2 , créé par la matière qui remplissait cette cavité sphérique. En utilisant les densités de courant équivalentes, la magnétisation étant supposée homogène, les champs liés aux discontinuités de \vec{M} aux frontières du milieu valent $-\frac{2}{3} \mu_0 \vec{M}$ pour la cavité sphérique et $\mathcal{D} \mu_0 \vec{M}$ pour la surface extérieure limitant l'échantillon (\mathcal{D} , facteur de forme, varie entre 2/3 pour la sphère et 1/2 pour un cylindre infini transverse). En général, le champ \vec{B}_2 créé par la matière de la cavité sphérique en son centre est nul, la moyenne des interactions dipolaires entre le moment placé en P et l'ensemble des autres moments isotropément répartis dans la sphère étant nulle. Ainsi la correction diamagnétique du champ local se met sous la forme :

$$\Delta \vec{B}_d = \left(\mathcal{D} - \frac{2}{3} \right) \mu_0 \vec{M}_d \quad \text{avec } \mu_0 \vec{M}_d \approx \chi_m \vec{B}_0 \quad (\text{IV-2})$$

Ainsi à 8280 G, l'effet diamagnétique de volume de l'eau ($\chi_m = -8,8 \cdot 10^{-6}$ en unités SI), nul pour une sonde sphérique, atteint 12 mG pour un cylindre transverse infini; notre correction de 6 mG pour le cylindre tronqué paraît donc raisonnable.

Nous avons ensuite étudié l'effet des ions paramagnétiques (Fe^{3+}) utilisés pour doper l'eau. Pour estimer l'ordre de grandeur de cet effet, nous avons comparé les résultats obtenus avec des solutions de molarité N/10 et N/100. Nos observations sur les sondes cylindriques et sphériques sont qualitativement analogues à celles de DICKINSON (⁶³) et prouvent en particulier que l'équation (IV-2) n'est plus valable pour décrire la composante du champ local due aux ions paramagnétiques. Suivant DICKINSON, nous écrivons la composante paramagnétique du champ sous la forme :

$$\Delta \vec{B}_p = \left(\mathcal{D} - \frac{2}{3} \right) \mu_0 \vec{M}_p + q \mu_0 \vec{M}_p \quad (\text{IV-3})$$

Le terme $q \mu_0 \vec{M}_D$ ainsi introduit n'est autre que le champ \vec{B}_2 de la théorie de Debye qui, dans le cas d'ions paramagnétiques, est en général non nul (⁶³).

Pour notre solution de nitrate ferrique, le coefficient q mesuré est de l'ordre de 0,9 (précision de l'ordre de 20%). Cet effet est suffisamment important pour contrebalancer largement l'effet du facteur de forme. La correction à apporter à nos résultats bruts est donc de même sens que celle due au diamagnétisme de l'eau; elle en est beaucoup plus faible, de l'ordre de 1 mG à 8280 G pour une solution N/100.

Globalement, la correction à apporter à notre résultat brut (8.280,002 G) est donc de -17 mG (-10 mG pour les inhomogénéités, -6 mGs pour l'effet diamagnétique de volume et -1 mG pour l'effet des ions paramagnétiques).

Nous avons étudié un certain nombre d'autres sources possibles d'erreurs systématiques sans résultat significatif. C'est ainsi que nous avons exploré l'influence éventuelle d'impuretés paramagnétiques dans le fil de cuivre de la bobine en testant successivement plusieurs petites bobines (de diamètres et longueurs identiques), réalisées avec des fils de diamètres variés pris dans différents échantillons de cuivre électrolytique: nous n'avons pu mettre en évidence aucun effet systématique. Nous avons cherché à tester l'influence des modifications de la répartition des masses métalliques qui interviennent lorsqu'on met en place la sonde à RMN pour étalonner le champ; ces modifications, mineures, concernent une zone distante de 5 cm au moins de la région centrale où l'on mesure le champ. Cette expérience a également été négative. Compte tenu de la sensibilité de notre système de détection, de tels effets, s'ils existent, sont au plus de l'ordre du milligauss.

En conclusion, la plage de dispersion des 6 mesures réalisées sur le croisement de niveau à 8280 G étant de 6 mG (± 3 mG) et compte tenu des trois corrections faites, nous estimons que la précision sur la valeur de ce croisement de niveau est de l'ordre de 1 ppm.

b) Influence du champ motionnel

Dans la recherche d'erreurs systématiques, nous avons en outre évalué l'effet Stark dû au champ motionnel : bien qu'il soit difficile d'évaluer avec précision la vitesse des particules excitées de la cible, il semble toutefois raisonnable de lui assigner une borne supérieure de 50 km/s (les diverses expériences réalisées sur ce type de collisions inélastiques (⁶⁴), dans ce domaine d'énergie, conduisent en général à des estimations plutôt inférieures de l'ordre de 10 km/s). Le champ motionnel vu par l'atome effectuant ce recul est alors au maximum de l'ordre de 40 kV /m à 8000 G ce qui introduit, pour le croisement à 8280 G, un déplacement (moyenné sur les différentes directions de recul) de 0,15 mG vers les champs faibles.

Nous avons également estimé l'effet Stark motionnel subi par les atomes de la cible dans les états 3^3P et 4^3P . Compte tenu de la très forte variation de l'effet Stark avec n , l'effet motionnel croît légèrement en valeur absolue : les déplacements du croisement H_3 des niveaux 3^3P et 4^3P sont respectivement au maximum de l'ordre de 0,25 mG et 0,60 mG ce qui reste totalement négligeable devant l'incertitude expérimentale.

Certaines expériences ayant été effectuées avec un jet excitateur d'hélium, il y a lieu de se demander, dans ce cas, si la contribution au signal observé due aux atomes du jet (d'énergie de l'ordre de 50 keV) n'introduit pas une erreur dans le pointé de la résonance. En effet, pour ces atomes dans le niveau 2^3P par exemple, l'effet Stark motionnel déplace le croisement de 315 mG; en fait, dans nos conditions expérimentales d'observation, ce signal est inobservable et ceci pour deux raisons principales : premièrement, on observe le jet sur une longueur de 1 cm seulement c'est-à-dire pendant un laps de temps τ_0 (6 à 7 ns) très inférieur à la durée de vie radiative du niveau envisagé ($\tau \sim 100$ ns); à égale probabilité d'excitation de la cible et du jet, le signal dû aux atomes du jet est donc globalement 16 fois plus faible que celui dû aux atomes de la cible. De plus, le centre de la zone d'observation est situé à 15 mm environ du début de la zone d'interaction du jet et de la cible. Les atomes du jet que l'on détecte ont donc séjourné dans l'état excité pendant une durée qui est au plus de l'ordre de 15 ns : la largeur du signal de croisement de niveau observé sur cette portion du jet sera donc environ 10 fois plus large que le signal observé sur la cible et cela sans tenir compte des collisions relaxantes.

En conclusion, à son maximum, l'intensité du signal dû aux atomes excités du jet est donc au plus égale à 6×10^{-3} fois l'intensité du signal de croisement dû aux atomes de la cible; compte tenu de sa largeur, il constitue tout au plus un léger fond continu qui ne peut perturber le pointé du signal dû aux atomes de la cible, ce qui a posteriori justifie le fait que nous n'ayons observé aucune asymétrie significative de la raie de résonance obtenue par excitation avec un jet d'hélium.

c) Examen de diverses causes d'erreurs systématiques

Dans notre recherche d'erreurs systématiques éventuelles, nous avons en outre évalué un certain nombre de phénomènes qui se sont avérés totalement négligeables comme, par exemple, le champ magnétique lié à la fraction ionisée du jet qui traverse la cellule (ordre de grandeur maximal : quelques dizaines de μG). Nous avons également envisagé la possibilité d'un shift de la résonance lié à l'existence éventuelle de collisions avec formation temporaire de molécules He^*-He (phénomène analogue à celui étudié par C. BOUCHIAT, M.A. BOUCHIAT et L. POTTIER (⁶⁵)). Dans les milieux dilués dans lesquels nous avons travaillé (au plus quelques 10^{-2} torr), il ne semble pas que de tels effets puissent être importants; l'étude expérimentale en fonction de la pression n'a pas donné de résultats concluants à ce sujet.

Accessoirement, l'étude de la largeur du signal de croisement de niveau en fonction de la pression du gaz cible nous a permis de déterminer la durée de vie de l'état excité du 2^3P . En sélectionnant les résultats obtenus pour des particules incidentes de nature et d'énergie données (et par suite pour des atomes excités possédant approximativement la même vitesse de recul), nous avons déterminé la durée de vie du 2^3P pour deux séries de résultats expérimentaux (figure XI); l'une correspondant à une excitation par des atomes d'hélium d'énergie de l'ordre de 50 keV, l'autre à une excitation par des atomes d'hydrogène de 20 keV. On trouve une demi-largeur en champ nul Γ de l'ordre de 0,4 G d'où l'on déduit la durée de vie du niveau 2^3P :

$$\tau = \frac{\hbar}{2\mu_B \Gamma \Delta_p} \quad (\text{IV-4})$$

où Δ_p mesure la différence de pente des niveaux qui se croisent ($\Delta_p = 2,53$ à 8280 G).

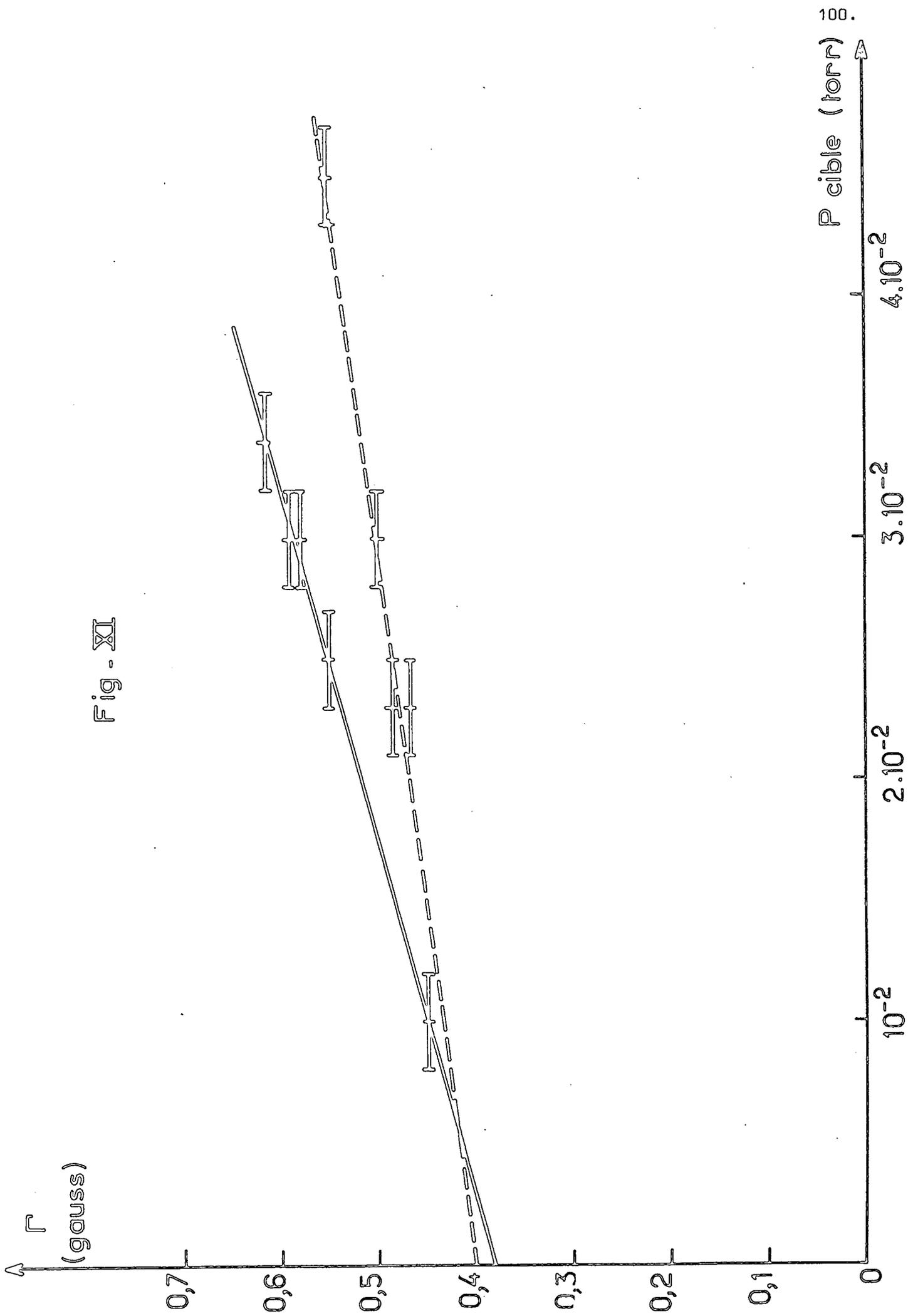


Fig - XI

On trouve ainsi :

$$\tau = 115 \pm 20 \text{ ns}$$

résultat compatible avec ceux obtenus antérieurement par diverses techniques (⁶⁶)(⁶⁷). L'imprécision de notre détermination est essentiellement due aux incertitudes importantes entachant la mesure de la pression de la cible (effectuée avec une jauge Pirani dont l'étalonnage et la fidélité sont sujets à caution).

C. Résultats expérimentaux

a) Les croisements mesurés

Les mesures effectuées sur les niveaux n³P de l'hélium ont donné les résultats suivants : les incertitudes consignées ci-dessous correspondent à la plage totale de dispersion des mesures réalisées, augmentée éventuellement de l'incertitude de la mesure du champ magnétique :

$$2^3\text{P} \quad H_1 = 562,850 \text{ G} \pm 15 \text{ mG}$$

$$H_2 = 578,480 \text{ G} \pm 15 \text{ mG}$$

$$H_3 = 8279,985 \text{ G} \pm 8 \text{ mG}$$

$$3^3\text{P} \quad H_3 = 2277,125 \text{ G} \pm 15 \text{ mG}$$

$$4^3\text{P} \quad H_3 = 928,370 \text{ G} \pm 20 \text{ mG}$$

Seul le croisement H₃ du 2³P a été mesuré avec tous les perfectionnements décrits au § A-b-c. Pour les quatre autres mesures, l'écart quadratique moyen est inférieur à 10 mG.

L'étalonnage des croisements de niveaux H₁, H₂ du 2³P a été fait avec le gaussmètre AEG; le résultat donné ici a été corrigé de l'erreur systématique signalée au § A-c; toutefois, ces mesures indirectes peuvent de ce fait se trouver entachées d'une erreur systématique que nous estimons inférieure à l'incertitude notée.

La mesure du champ sur les croisements H₃ des niveaux 3³P et 4³P a été faite directement avec le gaussmètre à pont de type Bloembergen (largeur de raie 60 mG).

Le résultat H₃ du niveau 2³P est la moyenne des expériences réalisées dans les diverses conditions décrites au § A-c, corrigée des erreurs systématiques étudiées au § B.

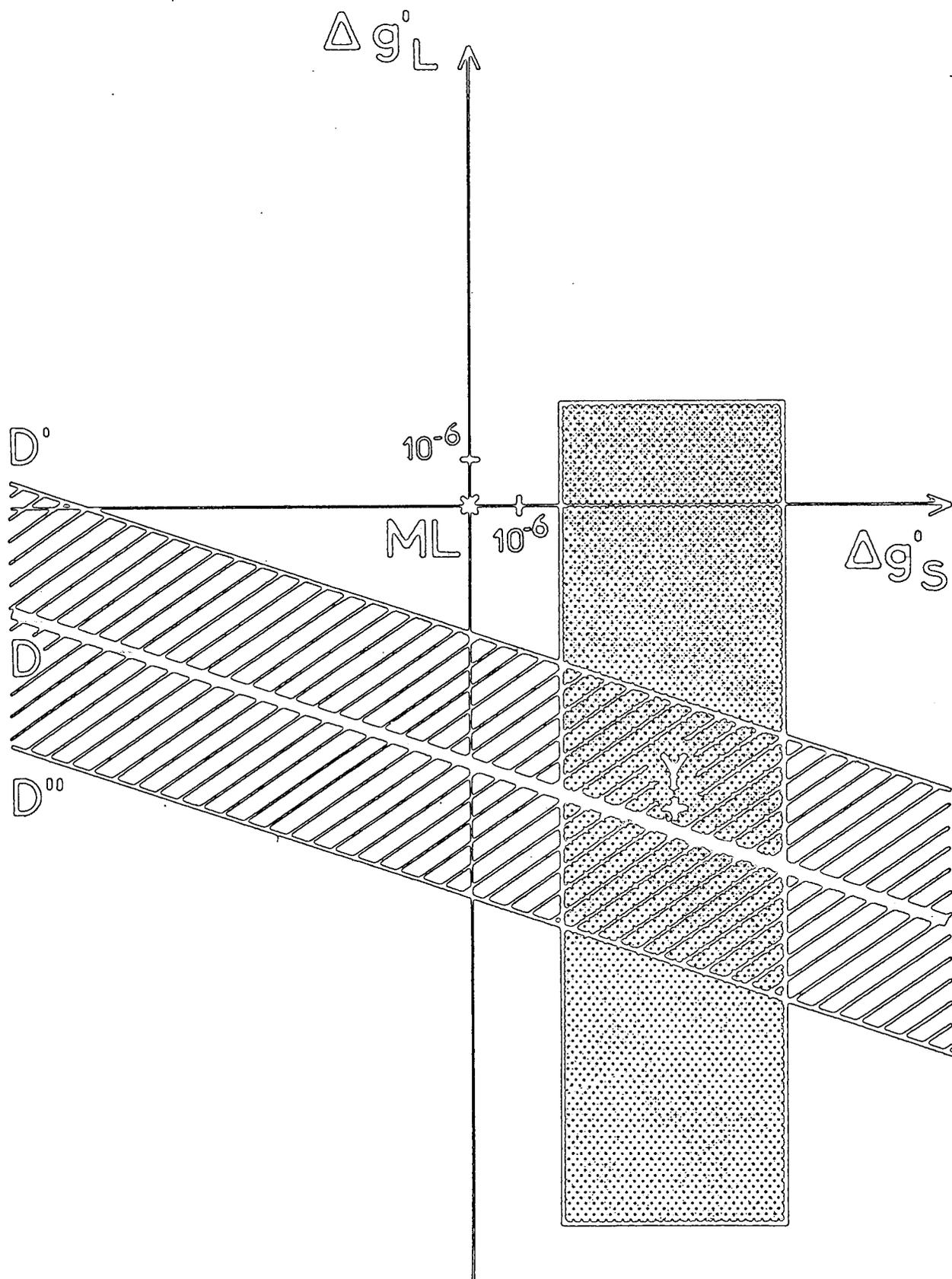


Fig - XII

b) Structures fines ou facteurs de Landé

- 23p

Nos mesures sont à comparer aux mesures de très grande précision réalisées sur ce niveau à Yale par PICHANICK, LEWIS, HUGHES et al. (9) (10)(46) dans une expérience de résonance magnétique sur jet avec détection de type Rabi. Nos mesures sont totalement compatibles avec les leurs ^{☆)} mais ne permettent pas, avec une précision semblable, de déterminer simultanément les intervalles de structure fine et les facteurs de Landé.

Utilisant les valeurs expérimentales des structures E_{01} et E_{12} mesurées à Yale respectivement à 1,2 ppm et 2,2 ppm près et la position H_3 déterminée dans cette expérience, il est possible d'en tirer une relation entre g'_s et g'_L . Sur la figure XII qui représente un diagramme $\Delta g'_s = g'_s - g'_{sth}$, $\Delta g'_L = g'_L - g'_{Lth}$ centré sur le couple de valeurs ($g'_{sth} = 2.002\ 238\ 8$, $g'_{Lth} = 0,999\ 873$ calculées par M.L. LEWIS (47)), cette relation entre g'_s et g'_L est représentée localement par la droite D. Le domaine d'incertitude (erreur quadratique) est compris entre les deux droites en tireté D' et D" (région hachurée). Nous avons porté sur le même diagramme les résultats de l'expérience de Yale (46) (région grisée). L'examen de ce diagramme met en évidence la compatibilité de notre mesure avec celle de S.A. LEWIS (46) (le gain de précision sur la détermination de g'_L est lié au fait que le croisement étudié est approximativement un croisement $\Delta m_L = 2$ donc très sensible à g'_L , alors que les transitions mesurées par les auteurs précédemment cités sont essentiellement sensibles à g'_s). Dans la mesure où l'incertitude sur le g'_s théorique est faible (vraisemblablement inférieure à $5 \cdot 10^{-7}$), on peut tirer de notre mesure une détermination de g'_L :

$$g'_L = .999\ 8678 \pm 2.9 \times 10^{-6} = g_L + (4.9 \pm 2.9) 10^{-6}$$

☆)

Les valeurs des croisements de niveaux calculés avec les données numériques des références (2), (10), (25) sont :

$$H_1 = 562,859\ G, \quad H_2 = 578,489\ G, \quad H_3 = 8279,983\ G$$

Ces résultats semblent mettre en évidence sur nos mesures des croisements en champs faibles une erreur systématique vraisemblablement liée à la procédure d'étalonnage (cf. § C-a).

L'incertitude notée ici a été calculée par linéarisation de la fonction $g'_L = f(H_3, E_{02}, E_{12}, g'_s, g'_x, R_{15})$ au voisinage du point considéré. Il est intéressant d'en donner l'expression explicite pour avoir une idée plus précise des différentes causes d'incertitudes :

$$\frac{\delta g'_L}{g'_L} = - 1,80 \frac{\delta H_3}{H_3} + 1,84 \frac{\delta E_{02}}{E_{02}} + 1,2 \cdot 10^{-2} \frac{\delta E_{12}}{E_{12}} - 0,7 \frac{\delta g'_s}{g'_s} - 1,1 \cdot 10^{-6} \frac{\delta R_{15}}{R_{15}} - 3 \cdot 10^{-8} \frac{\delta g'_x}{g'_x}$$

Cette expression montre que la majeure partie de l'incertitude sur g'_L provient des incertitudes expérimentales sur H_3 et E_{02} ; l'incertitude notée sur le résultat expérimental de g'_L est une erreur quadratique calculée à partir de la formule ci-dessus (l'incertitude sur g'_s a été évaluée à $5 \cdot 10^{-7}$, les incertitudes sur R_{15} et g'_x sont celles estimées dans le chapitre précédent : tableau V).

Le désaccord entre notre détermination expérimentale de g'_L et la valeur théorique (⁴⁷) reste inexpliqué (l'étude théorique faite dans le chapitre III tendant à prouver que les termes négligés dans les calculs de M. LEWIS sont au plus de l'ordre de 10^{-6}).

- 3³p

Il n'existe pas, à notre connaissance, de mesure du facteur de Landé de ces niveaux et la meilleure détermination de la structure était celle de WIEDER et LAMB (⁶⁸) :

$$E_{01} = 8113,78 \pm ,22 \text{ MHz}$$

$$E_{12} = 658,55 \pm ,15 \text{ MHz}$$

Nous avons choisi de faire une nouvelle détermination indépendante de E_{02} ce qui nécessitait le calcul de g'_s , g'_L , g'_x et de l'effet diamagnétique (voir chapitre III, tableaux V et VI).

L'utilisation de ces résultats et de la valeur E_{12} donnée par LAMB conduit à :

$$E_{02} = 8772.565 \pm ,062 \text{ MHz}$$

avec une incertitude quadratique de $0,7 \times 10^{-5}$ qui provient essentiellement pour $6 \cdot 10^{-6}$ de H_3 , $1,6 \cdot 10^{-6}$ de E_{12} et $1,6 \cdot 10^{-6}$ de g'_L .

Cette valeur est compatible avec la détermination antérieure de LAMB donnée ci-dessus; elle est en très bon accord avec le résultat théorique de Y. ACCAD, C1. PEKERIS, B. SCHIFF (⁵¹) :

$$E_{02} = 8772,5 \text{ MHz}$$

- 4^3P

La situation est identique à celle du niveau $n = 3$; la meilleure détermination antérieure des structures est celle de KAUL (⁶⁹) pour l'intervalle ν_{01} :

$$E_{01} = 3305,72 \pm ,28 \text{ MHz}$$

Pour l'intervalle ν_{12} , la plus précise est celle de MAUJEAN et DESCOUBES (⁷⁰) :

$$E_{12} = 269,0 \pm 0,1 \text{ MHz}$$

(c'est celle que nous avons adoptée dans ce qui suit en dépit du désaccord inexplicable avec la détermination plus récente de MILLER et FREUND (⁵²) : $270,4 \pm 0,7 \text{ MHz}$).

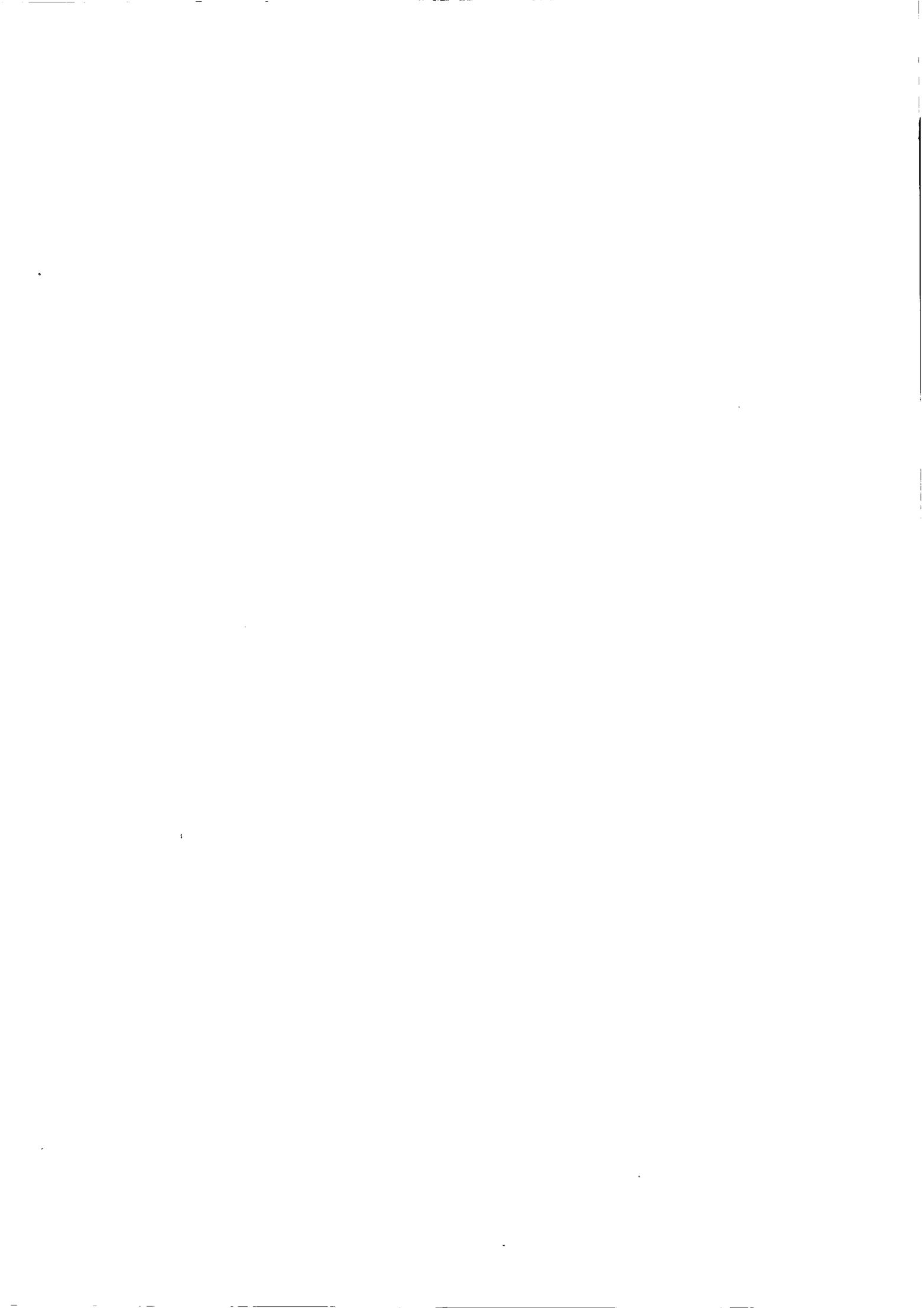
Comme pour le niveau $n = 3$, nous avons calculé une valeur théorique plausible des facteurs g'_S , g'_L , g'_X et de l'effet diamagnétique (chap. III, tableaux 5 et 6). Les incertitudes sont du même ordre de grandeur que pour $n = 3$. Nous trouvons :

$$E_{02} = 3576,475 \pm 0,075 \text{ MHz}$$

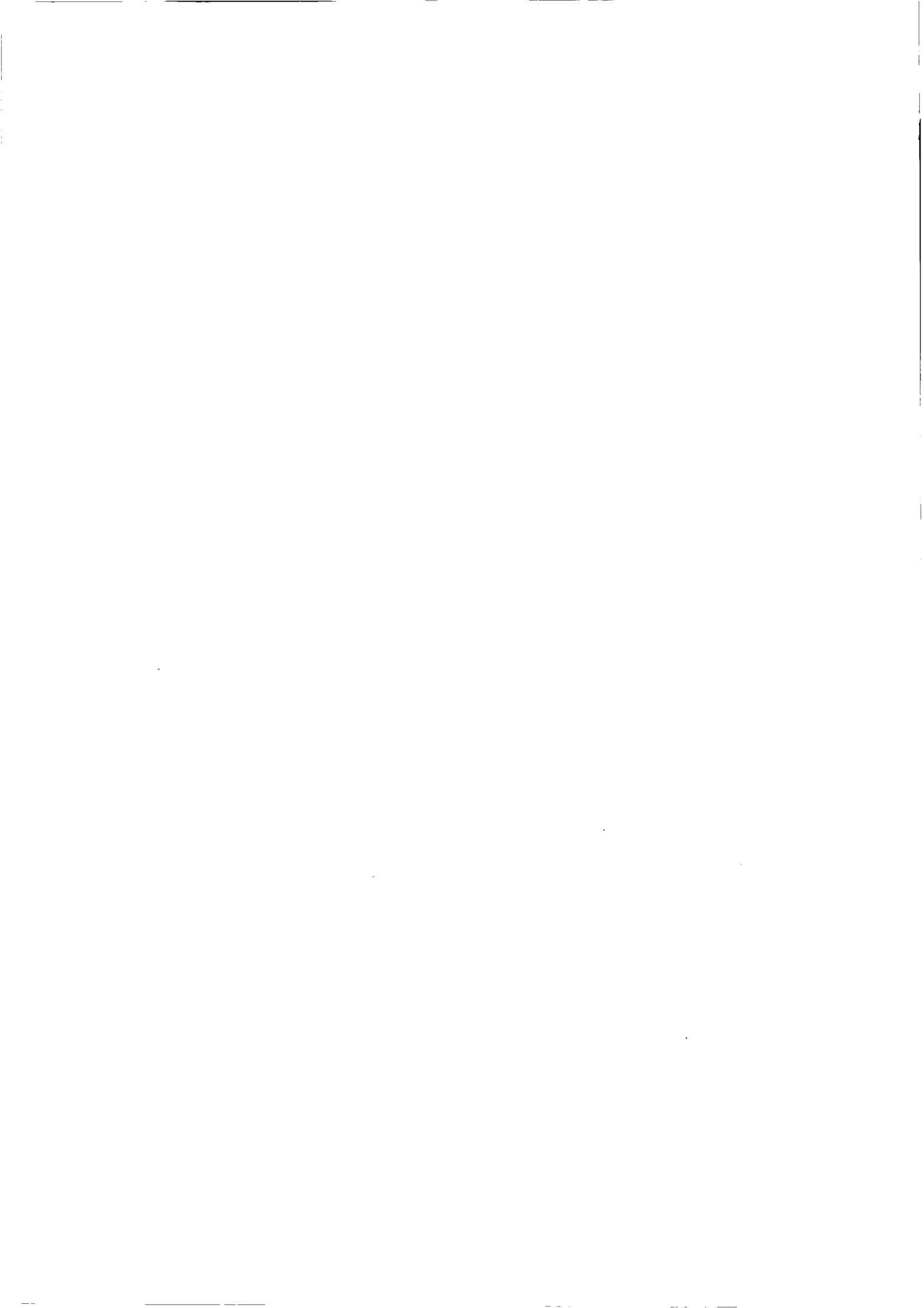
à comparer à la valeur théorique (²⁷) :

$$E_{02} = 3576 \text{ MHz}$$

En conclusion, cette expérience nous a permis de réaliser quelques mesures de haute précision sur les structures fines de l'hélium. Dans le niveau 2^3P , nos résultats sont totalement compatibles avec les résultats expérimentaux obtenus à l'Université de Yale (⁴⁶); notre valeur de g'_L semble confirmer un léger désaccord avec la valeur théorique de M.L. LEWIS (⁴⁷). Dans les niveaux $n = 3$ et 4, nous avons pu améliorer la précision des déterminations du grand intervalle E_{02} , les résultats expérimentaux sont en très bon accord avec les résultats de calculs récents (⁵¹).



TROISIEME PARTIE
MONTAGE EXPERIMENTAL







CHAPITRE V

Les expériences rapportées dans ce mémoire relèvent toutes de la technique des croisements de niveaux dans des champs magnétiques d'intensité moyenne (500 à 13000 G). L'originalité de ces expériences réside dans le mode d'excitation des atomes ou des ions étudiés qui est réalisé par collision avec un jet atomique d'atomes légers de moyenne énergie (20 - 50 kev). Cette technique relève de la spectroscopie par impact sur cible gazeuse ("beam-gas spectroscopy") dont elle possède les avantages essentiels.

○ Le plus incontestable est certainement son caractère de source spectroscopique à très large spectre. En ce sens, les techniques de "beam-gas spectroscopy", et plus encore de "beam-foil spectroscopy" (spectroscopie par faisceau lame), ont complètement renouvelé et considérablement agrandi le champ de la spectroscopie et en particulier celui des espèces ionisées. Dans nos conditions expérimentales, nous observons dans la fluorescence de la cible gazeuse (He, Ne, H₂, O₂, N₂) non seulement le spectre de l'atome neutre excité, mais également et de façon très intense ceux des espèces une fois ionisées, et éventuellement quelques raies de l'espèce deux fois ionisée. L'absence de règles de sélection fait d'autre part de cet instrument une source hautement non sélective.

○ Le deuxième avantage de notre montage, plus spécifique des faisceaux neutres réside dans le fait que le jet atomique est insensible à la présence de champs magnétiques (ou électriques) même très intenses ne présentant pas de violents gradients; ceci permet d'exciter la cible dans des conditions géométriques parfaitement définies ce qui est un paramètre essentiel pour l'analyse fine des formes de raies, analyse indispensable aux mesures de haute précision. Comme nous le montrerons dans l'étude détaillée du jet, les conditions expérimentales réalisées ont été optimisées pour la production de faisceaux d'atomes neutres de grande intensité.

Les limitations de ce type d'expériences sont de deux ordres.

□ Dans le domaine d'énergie envisagé, les sections efficaces d'excitation décroissent rapidement avec n (voir par exemple VAN ECK (⁷¹)). Les niveaux de n très élevés sont peu excités. Dans ce domaine, il est certain que les progrès très rapides des techniques d'excitation par lasers à colorants (continus ou pulsés) et l'extension de la spectroscopie sans effet Doppler utilisant ces nouvelles sources (spectroscopie d'absorption saturée, spectroscopie à deux photons, battements quantiques avec sources lasers pulsées) réduisent considérablement l'intérêt de l'excitation par faisceau atomique et ceci en particulier pour l'étude des niveaux très excités (niveaux de Rydberg). Toutefois, le domaine d'étude des niveaux profonds et moyennement excités des ions une fois et plusieurs fois chargés reste encore le quasi monopole des sources "beam foil" ou "beam-gas".

□ La deuxième limitation est peut-être un peu plus particulièrement liée à notre type de source et d'accélérateur.

L'observation de résonances de croisement de niveaux nécessite l'excitation cohérente des sous-niveaux qui se croisent. Il faut pour cela réaliser une excitation anisotrope de la cible. Or, dans le domaine d'énergie accessible avec notre accélérateur (20 - 50 keV), compte tenu des particules excitatrices légères utilisées jusqu'ici (H, He), les collisions sont très peu anisotropes. Le taux de polarisation des raies de fluorescence est en général faible. Pour l'hélium par exemple, maximal pour les niveaux ¹D (sur lesquels il atteint environ 25%) il décroît assez fortement en passant aux niveaux de symétrie ¹P ou ¹F. Les multiplets apparaissent en règle générale moins polarisés que les singulets et comme, en définitive, nous nous intéressons non pas à l'ensemble du multiplet en champ nul, mais au croisement de deux sous-niveaux seulement de celui-ci, nous arrivons à la recherche de signaux très faibles atteignant au plus 1% de la fluorescence totale du multiplet dans le cas très favorable du niveau 2³P de l'hélium, et descendant à beaucoup moins de 1‰ pour les signaux de croisements des niveaux F et D de He⁺ par exemple. Dans le domaine d'énergie qui nous est accessible avec les projectiles déjà cités (He, H), les sections efficaces totales comme les taux de polarisation dépendent très peu de l'énergie et du projectile utilisé, le seul paramètre à optimiser est l'intensité et la stabilité du faisceau excitateur. A énergie égale, l'utilisation de particules excitatrices plus lourdes serait vraisemblablement plus favorable à de telles études (comme semblent le prouver les résultats obtenus par M. CARRÉ (⁶⁴)), mais à l'heure actuelle, nous ne maîtrisons pas

assez bien la technologie des sources HF d'atomes lourds pour que le gain sur les taux d'anisotropie compense la perte d'intensité et de qualité du jet.

En ce qui concerne enfin la spectroscopie par croisement de niveaux, ses avantages et ses inconvénients que nous avons rappelés dans l'introduction de ce mémoire, sont bien connus. D'un point de vue plus technique, les difficultés sont de deux ordres :

- L'obtention d'une précision de 10^{-6} sur la valeur absolue d'un champ magnétique de l'ordre de 10000 G soulève un certain nombre de difficultés concernant l'homogénéité, la stabilité, le repérage, la mesure du champ en valeur absolue.
- Quelle que soit la précision de mesure souhaitée, l'inertie de l'aimant interdit la possibilité de faire des balayages rapides du champ sur une amplitude grande devant la largeur des signaux mesurés (qui est de l'ordre du gauss). Il est donc impossible d'utiliser au mieux les possibilités d'amélioration du rapport signal sur bruit par statistique sur un très grand nombre de passages; ce qui impose un mode d'acquisition des données extrêmement contraignant comme nous le verrons à la fin de ce chapitre.

En résumé, après avoir dressé dans le paragraphe A un rapide schéma d'ensemble de l'expérience, nous consacrons le paragraphe B à la technologie du jet atomique (source RF, échange de charge, détection). Le paragraphe C est entièrement dévolu aux problèmes du champ magnétique, sa régulation, son balayage, sa mesure. Dans le paragraphe D, enfin, nous étudions les divers modes d'acquisition des données.

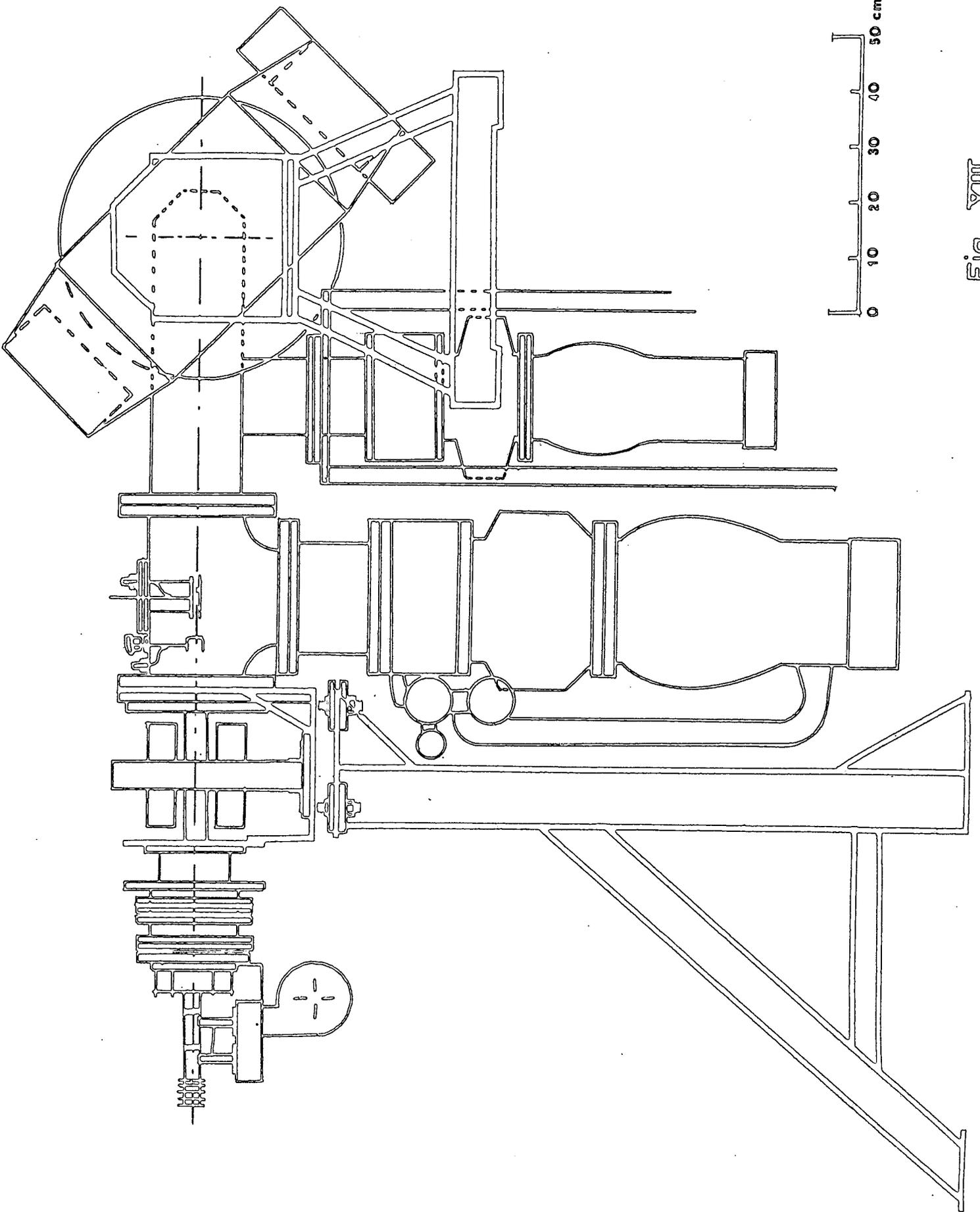


Fig - XIII

A. Schéma d'ensemble du montage

Le schéma d'ensemble du montage est reporté sur la figure V (un croquis coté très simplifié apparaît sur la figure XIII et une photographie d'ensemble sur la figure XIV).

L'excitation cohérente nécessaire à la mise en évidence des croisements de niveaux est réalisée dans la cible B par collision avec les atomes d'un jet atomique perpendiculaire au champ magnétique.

Le jet atomique est obtenu à partir d'un faisceau ionique (H^+ ou He^+) issu d'une source RF classique, accéléré (20 à 50 keV) et focalisé dans la chambre d'échange de charge A. L'intensité du faisceau d'atomes neutres, peu divergent qui pénètre ensuite dans la chambre de collision B est de l'ordre de 10^{14} atomes/mm².s.

Les diverses chambres de collision utilisées ont été réalisées en duralinox (matériau sélectionné en fonction des impératifs liés au vide et au champ magnétique). Nous représentons sur la figure VI celle qui nous a servi dans les dernières expériences de précision sur l'hélium. Le jet y pénètre par un diaphragme d'entrée de 5 mm de diamètre (réduit à 3 mm pour les mesures de grande précision). La lumière de fluorescence de la zone d'interaction (cylindre de 10 mm de long) peut être étudiée soit à 90°, soit à 45° du jet incident. Dans la direction $O\vec{U}$ coulisse sous vide une sonde à résonance magnétique de protons, dont l'échantillon peut ainsi prendre exactement la position du jet, ce qui permet de faire, dans les mêmes conditions d'environnement et de champ magnétique, alternativement une mesure de résonance de croisements de niveaux, puis une mesure de résonance magnétique des protons dans l'eau. Une deuxième sonde à RMN encastrée à l'extérieur de la cellule (sur l'axe du champ magnétique et à 18 mm de l'axe du jet) permet de faire un repérage permanent du champ. Nous avons en outre la possibilité d'introduire dans la direction Oy soit une troisième sonde à RMN (utilisée pour les mesures de très grande précision et les mesures d'inhomogénéités à l'intérieur de la cellule), soit une canne de lumière en quartz.

Le jet sort de la chambre de collision par un deuxième diaphragme de 5 mm de diamètre et il est ensuite détecté dans un dispositif fonctionnant soit en cage de Faraday pour les ions, soit en mesure d'émission secondaire pour les atomes.

L'ensemble du système est en vide dynamique assuré par deux pompes à diffusion NRC (dont les vitesses de pompage, au-dessus du baffle à azote liquide sont respectivement de 900 l/s et 400 l/s). Le dispositif de pompage est complété par deux pompes primaires Edwards. La pression est mesurée, en divers points du vide primaire par des jauges à thermocouple, dans la région du vide secondaire par des jauges à ionisation. La pression du gaz cible à l'intérieur de la chambre de collision est repérée par une jauge Pirani (si la fidélité et la reproductibilité d'une telle jauge sont douteuses, elle permet toutefois de faire en continu des mesures quasi insensibles au champ magnétique, ce qui représente un gros avantage dans le cas présent). L'ensemble du fonctionnement du banc de pompage et des divers systèmes de sécurité ont été automatisés au laboratoire. La pression usuelle dans la source est de l'ordre de $3 \cdot 10^{-2}$ torr, de l'ordre de 10^{-2} torr dans la cellule d'échange de charge; elle peut varier de 10^{-4} à $5 \cdot 10^{-2}$ torr dans la cible proprement dite; dans ces conditions, la pression dans la région intermédiaire varie de quelques 10^{-7} à 10^{-5} torr

Les signaux de fluorescence recueillis à 45 ou 90° de la direction d'excitation sont transportés jusqu'au photomultiplicateur situé loin de l'influence de l'aimant grâce à un faisceau de fibres optiques (en verre ou en quartz). Un polariseur tournant sur coussin d'air, de très faible dimension (de l'ordre de 50 x 50 x 50 mm hors tout) peut éventuellement être intercalé sur chacune des deux voies de détection. Par ailleurs, on peut également réaliser une modulation du signal par modulation du champ magnétique obtenue grâce à deux petites bobines intérieures à la cellule représentée sur la figure VI. Les deux gammes de fréquence des signaux modulés obtenus par ces deux techniques sont assez différentes :

- . 150 - 300 Hz pour la modulation de polarisation (les limitations étant essentiellement dues aux problèmes mécaniques d'équilibrage du polariseur)
- . 1 kHz à 20 kHz pour la modulation du champ (les limites étant ici imposées d'une part par la présence de l'électronique de stabilisation du champ et d'autre part par les courants de Foucault dans les flasques de la cellule).

Ayant ainsi tracé un schéma d'ensemble de l'expérience, nous allons maintenant passer à l'étude plus détaillée du jet atomique.

B. Le jet atomique

Comme nous l'avons déjà souligné, les qualités essentielles requises du jet atomique sont les suivantes : intensité optimale, grande stabilité et si possible très faible divergence, car compte tenu de l'encombrement des pompes secondaires et de l'aimant, la distance minimale entre la sortie de la source et la cible se trouvant dans l'entrefer de l'électroaimant est de l'ordre de 1,5 m.

L'unité de départ avec laquelle nous avons travaillé est un petit accélérateur ORTEC (20 - 50 keV) équipé d'une source de radiofréquence de type Thonemann (⁷²), d'une lentille de focalisation simple et d'un aimant de déviation permettant la sélection des diverses espèces ioniques produites.

a) La source

C'est le point le plus délicat du dispositif (fig. XV-a). Elle est excitée par couplage capacitif avec un autooscillateur d'une puissance de l'ordre de 100 watts qui oscille à une fréquence voisine de 80 MHz. L'efficacité de la décharge est augmentée à l'aide d'un champ magnétique statique axial de l'ordre de 600 G; son effet est triple : augmentation de la longueur de la trajectoire des électrons excitateurs, concentration du plasma et amortissement des oscillations de plasma qui nuisent à la stabilité du jet. Les ions sont extraits du plasma à l'aide d'un champ électrique statique créé par une différence de potentiel de 1 à 5 kV appliquée entre les extrémités du tube à décharge. La dispersion angulaire du faisceau est déterminée à ce niveau par les dimensions du tube de la sonde d'extraction ($L = 13.6 \text{ mm}$, $\varnothing = 1.6 \text{ mm}$) : elle est de 14° (angle au sommet).

Il est bien connu (voir par exemple l'article bibliographique de BLANC et DEGEILH (⁷³)) que l'intensité du courant de sortie d'une telle source dépend du potentiel d'extraction utilisé, de la valeur du champ magnétique axial, de la puissance H.F. dissipée dans la source et de la pression du gaz dans celle-ci. La stabilité de l'ensemble de ces paramètres est extrêmement importante pour la stabilité du jet : nous avons ainsi été amenés à utiliser pour la tension d'extraction une alimentation stabilisée en tension et pour l'alimentation de l'oscillateur une alimentation stabilisée en courant (toutes les deux à mieux de 10^{-4}), ce qui s'est avéré extrêmement bénéfique pour la qualité du jet. Le flux continu de gaz est par ailleurs assuré par une fuite thermoréglable (avec adjonction éventuelle d'une jonction au palladium pour

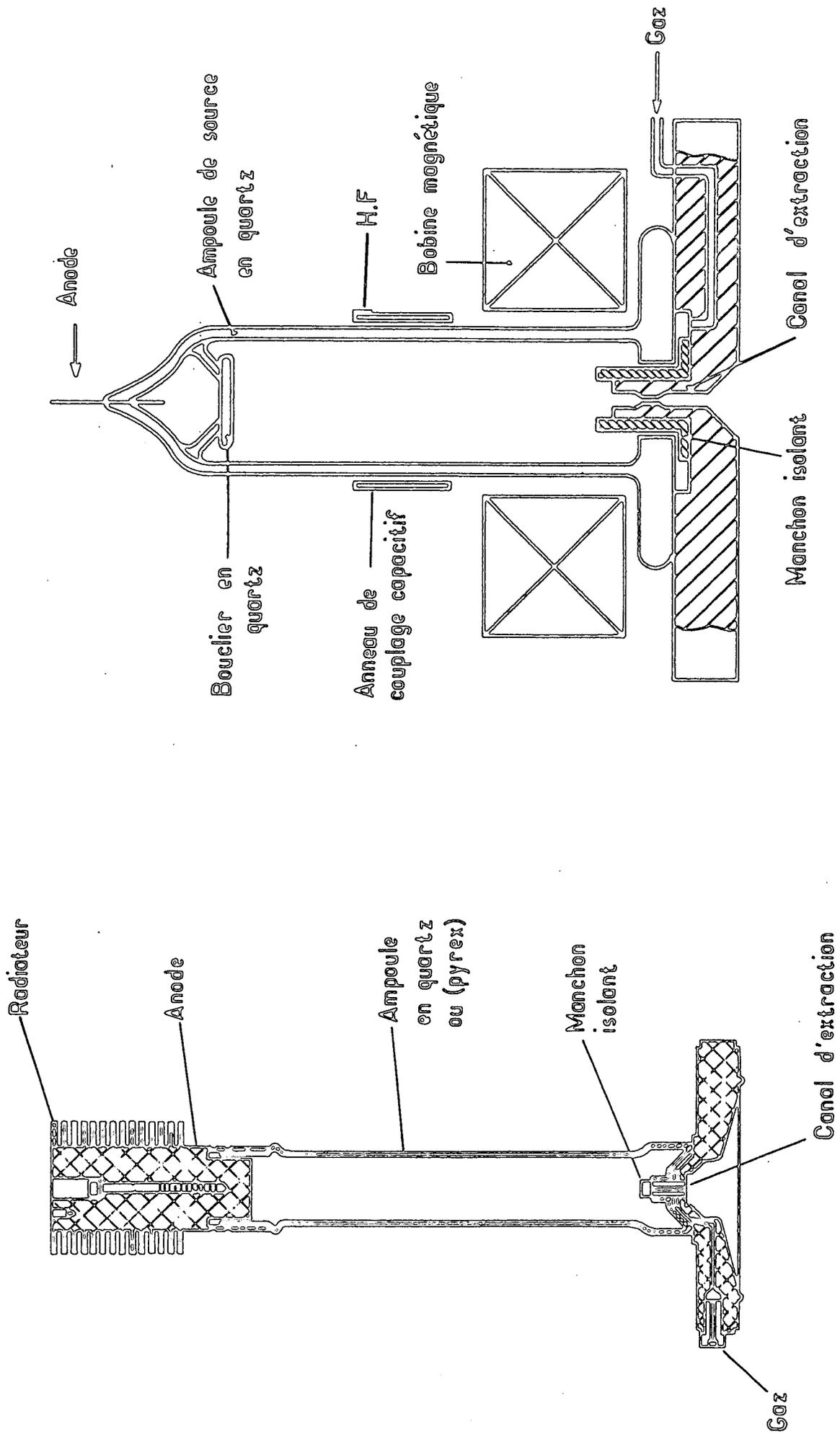


Fig - XXV

les faisceaux d'hydrogène) qui s'avère d'une très bonne stabilité après chauffage d'une demi-heure environ.

L'inconvénient majeur de ce type de source est sa durée de vie relativement brève. Les sources Ortec que nous avons utilisées à l'origine, de même que les sources Sames que nous avons testées par la suite (fig. XV-b), ont en effet une durée de vie moyenne de l'ordre de 200 heures (en fonctionnement à pleine intensité). Au bout de ce laps de temps, par suite de pulvérisation cathodique du métal de la sonde d'extraction, le verre de la source et le quartz du manchon isolant qui entoure le tube d'extraction se recouvrent de métal et deviennent légèrement conducteurs; il se produit alors des micro-claquages qui produisent des instabilités grandissantes sur le jet et qui nécessitent rapidement le reconditionnement de toute la source. L'expérience nous a prouvé que l'importance de ce phénomène et la stabilité ^(*) du jet émis dépendent fondamentalement non seulement du métal de la cathode (dont dépend le phénomène de pulvérisation cathodique), mais également de la géométrie et de l'état de surface de l'ensemble de la sonde extractrice. En ce qui concerne le métal de la cathode, c'est l'aluminium pur qui nous a donné les meilleurs résultats, et ceci, quel que soit le gaz utilisé dans la source. L'expérience nous a prouvé que le nickel, utilisé initialement dans les sources Ortec à Hélium ou à atomes plus lourds, est moins favorable que l'aluminium. Ce résultat confirme en tous points les études qui ont été faites sur l'émission secondaire et la pulvérisation cathodique des cibles métalliques bombardées par des ions d'atomes lourds d'énergie moyenne (10 - 100 kev) (voir par exemple C. FERT et N. COLOMBIÉ et al. (74)). Ces études ont en effet montré que, pour un projectile donné, c'était toujours avec une cible d'aluminium que l'émission secondaire et la pulvérisation cathodique étaient minimales. Les essais d'alliages (dural, inox) ont été médiocres ou franchement mauvais comme si les défauts du réseau métallique constituaient autant de points de faiblesse vis-à-vis de la pulvérisation cathodique.

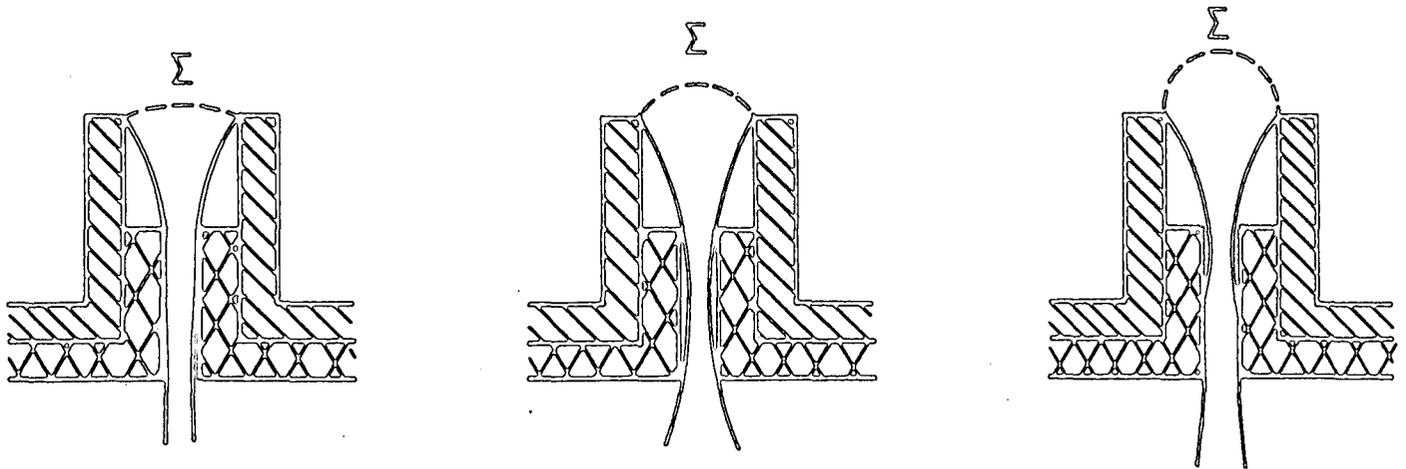
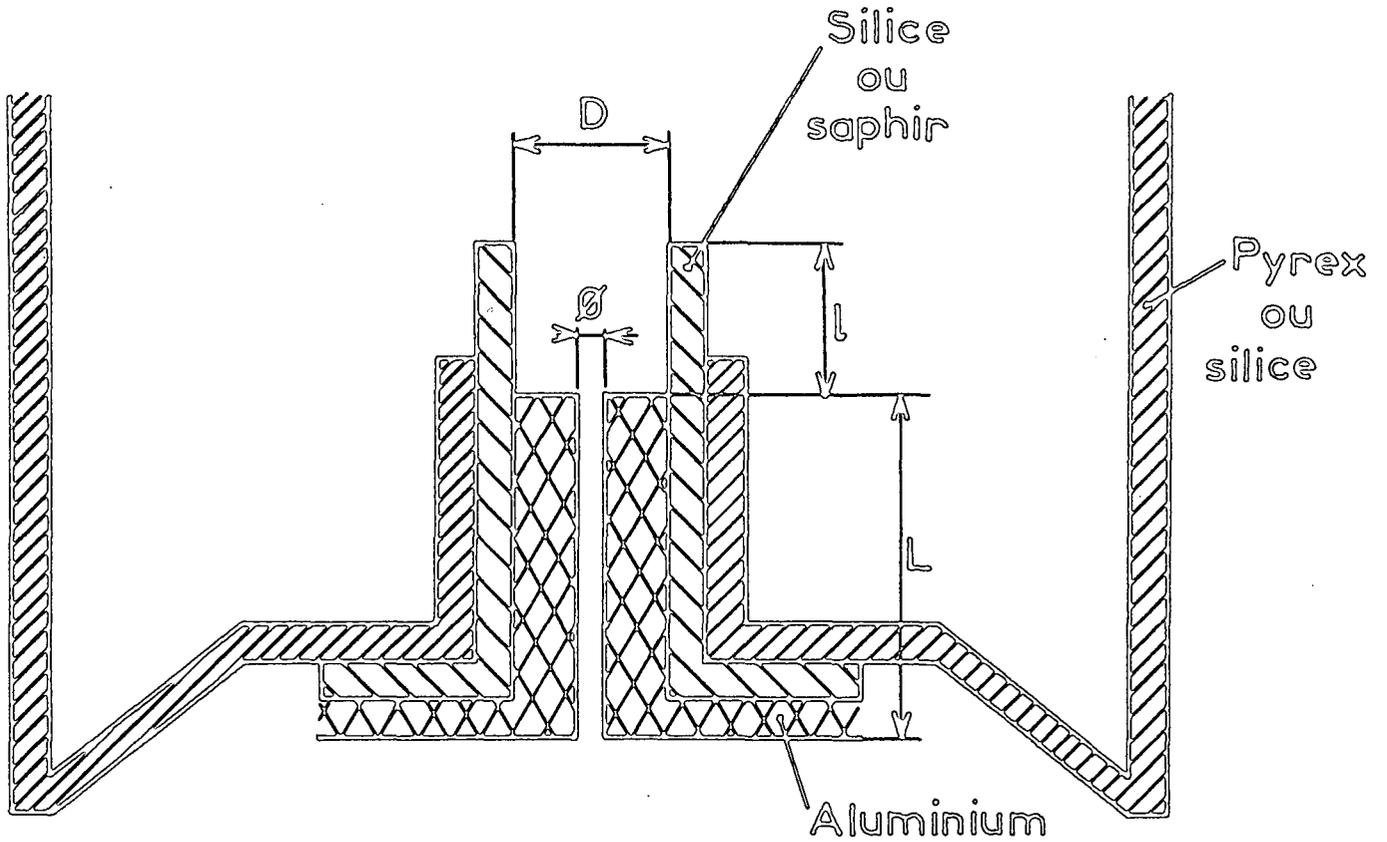
(*) *Notre critère de stabilité est particulièrement draconien, car il porte sur le jet après collimation au niveau de la cible B; nous avons pu constater que des régimes d'intensité totale stable pouvaient s'accompagner de fortes instabilités dans le diagramme d'émission de la source elle-même qui se répercutaient de façon dramatique après collimation au niveau de la cible B.*

La géométrie de la sonde extractrice s'est également avérée extrêmement cruciale tant pour la qualité du jet émis (intensité, stabilité) que pour la longévité de la source. Nous avons repris sur la figure XVI les détails du système d'extraction de la source de Moak (⁷⁵) (qui est la source commercialisée à Oak Ridge). Nous y voyons le fond de la source en pyrex, et la cathode en aluminium, protégée par un manchon isolant de silice (éventuellement de saphir) coaxial au canal d'extraction de la cathode. Dans une telle configuration, le manchon de silice joue un rôle essentiel. Il semble en effet que la limite du plasma qui forme un volume equipotentiel (au potentiel de l'anode) se maintienne à l'orifice de ce manchon, qui définit ainsi la forme de la surface émettrice d'ions.

Toute la différence de potentiel d'extraction des ions se trouve donc appliquée entre la limite du plasma Σ et la cathode. On comprend alors que l'état de surface du manchon isolant soit extrêmement critique pour la stabilité du jet : la souillure de cette surface, soit par condensation de vapeur d'huile, soit par pulvérisation cathodique, produit immédiatement des microclaquages et une distorsion de la frontière du plasma qui affecte considérablement la stabilité du jet.

Le dernier paramètre important concerne la géométrie de cette électrode d'extraction : avec le canal adapté à nos problèmes de focalisation à longue distance (dont les dimensions sont $\emptyset = 1.6$ mm; $L = 13.6$ mm), nous avons trouvé que la stabilité du jet, et la longévité de la source étaient maximales pour $l = D$ (voir fig. XVI) (ces conditions de fonctionnement sont assez voisines des conditions optimales déterminées par SERBINOV (⁷⁶) : $L/\phi = 5$; $D/\phi = 2$; $0,6 D \leq l \leq 0,8 D$. Compte tenu du faible diamètre du canal d'extraction, la condition $D/\phi = 2$ s'est avérée totalement caduque sur notre montage). Notons enfin que pour chaque géométrie de l'électrode d'extraction, il existe une tension optimale d'extraction qui correspond vraisemblablement à la focalisation correcte du jet dans le canal (nous avons dessiné, sur la figure XVI, d'après H. EUBANK et al. (⁷⁷), la forme du jet dans les trois situations : sous-focalisation (V extraction trop faible), bonne focalisation et surfocalisation (V extraction trop fort)).

En conclusion, il apparaît que les paramètres permettant d'optimiser le fonctionnement d'une telle source sont très nombreux, mais que la marge de liberté est assez faible lorsqu'on désire obtenir simultanément intensité, stabilité et longévité. Sans trop rechercher l'optimisation du paramètre intensité, nous savons maintenant réaliser des sources d'hélium dont le débit typique est de l'ordre de 500 μ A (à 3-4 kV d'extraction) et pour lesquelles le



V_{ext} trop faible

V_{ext} trop fort

Fig. XVI

bruit à court terme ($t < \text{seconde}$) est de l'ordre ou inférieur au 1%; la longévité de ces sources reste un paramètre encore trop aléatoire (200 heures au moins à plus de 1500 h. pour quelques spécimens exceptionnels).

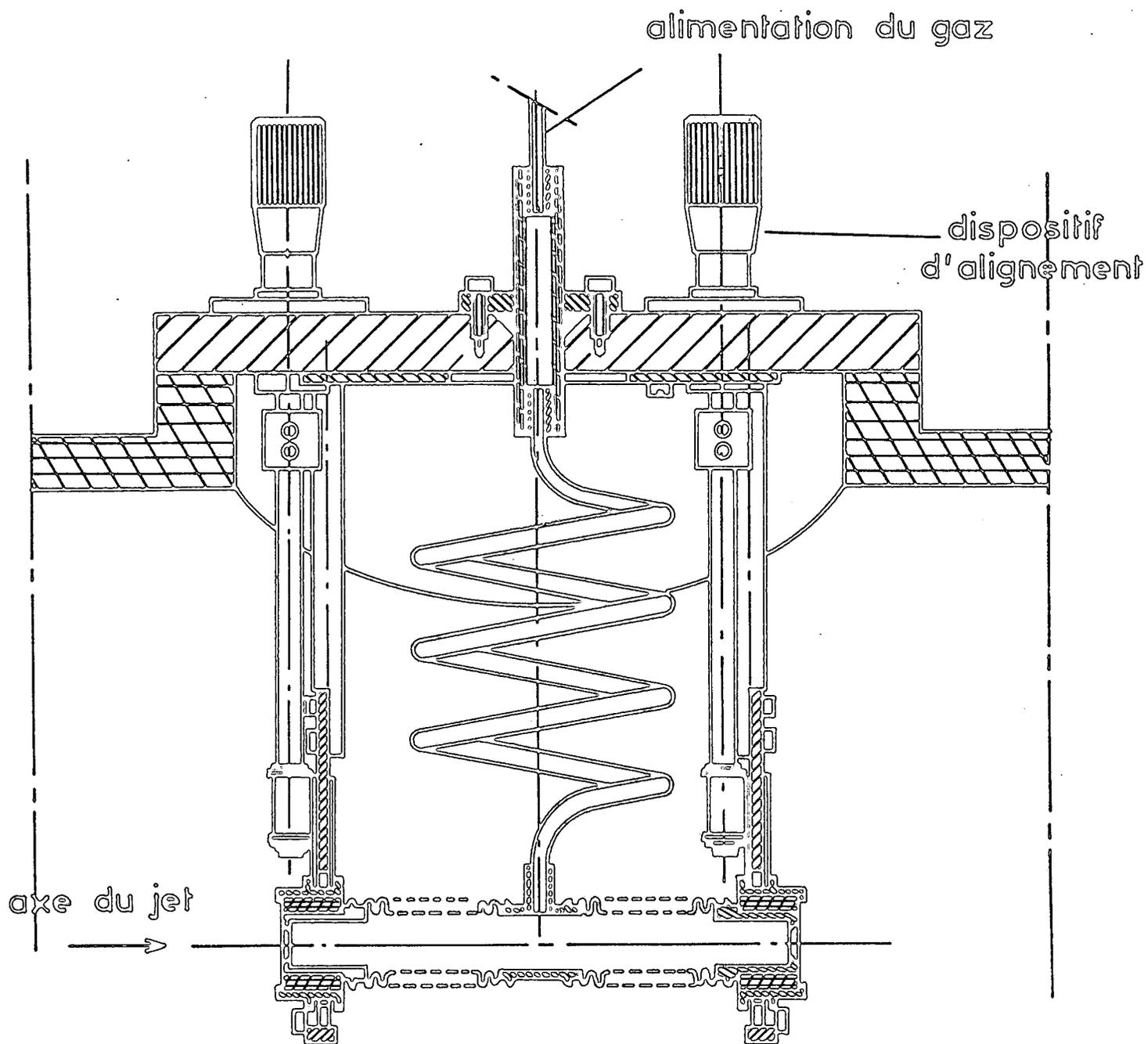
La stabilité à long terme ($t > 1 \text{ heure}$) du jet est essentiellement fonction de la stabilité de l'alimentation en gaz, de la stabilité de l'alimentation de l'oscillateur et de la stabilité des diverses alimentations haute tension : extraction, focalisation et accélération. L'utilisation générale d'alimentations stabilisées nous a apporté une stabilité à long terme de l'ordre de 1 à $2 \cdot 10^{-3}$ (après optimisation des paramètres et 1 heure de fonctionnement); ce qui autorise éventuellement de très longues périodes d'intégration de signaux. Le jet ionique ainsi obtenu est ensuite accéléré et focalisé dans le tube d'échange de charge A (fig. XVII), où la compétition entre les processus de capture d'électrons et d'ionisation conduit à un jet quasi équilibré, comme nous allons le montrer rapidement (cet aspect du montage a été étudié en grand détail dans la thèse de 3e cycle de P. RIVIERE (78)).

b) L'échange de charge

Dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, les sections efficaces de capture d'un électron sont particulièrement favorables (de l'ordre de 10^{-15} cm^2) et le processus d'échange de charge a un très bon rendement. Nous avons reporté sur les graphiques (XVIII-a et b) le pourcentage d'ions He^+ (resp H^+) neutralisés dans le jet équilibré après traversée de diverses cibles gazeuses (d'après des résultats rapportés par S.K. ALLISON et M. GARCIA-MUNOZ (79)). L'examen de ces courbes montre que, dans le domaine 20 - 50 keV, le rendement de l'échange est très bon pour le jet d'hélium (supérieur à 80%), honorable pour le jet d'hydrogène (> à 50% pour l'échange sur une cible d'hydrogène moléculaire).

Compte tenu de la valeur très importante des sections efficaces de capture en particulier, il suffit de maintenir dans la chambre d'échange (dont la longueur est de 10 cm) une pression de quelques $5 \cdot 10^{-2}$ torr environ pour obtenir un jet ayant atteint à 1% près sa composition d'équilibre.

Pour minimiser la diffusion angulaire qui accompagne l'échange de charge, nous choisissons dans la mesure du possible des collisions résonnantes ($\text{He}^+ + \text{He}$). Pour le jet d'hydrogène, l'échange de charge sur une cible d'hydrogène moléculaire est la meilleure solution, tant en ce qui concerne le pourcentage d'ions neutralisés, qu'en ce qui concerne la diffusion angulaire.



Chambre d'échange de charge

Fig - XVII

Pourcentage d'ions He^+
neutralisés après traversée
de diverses cibles gazeuses

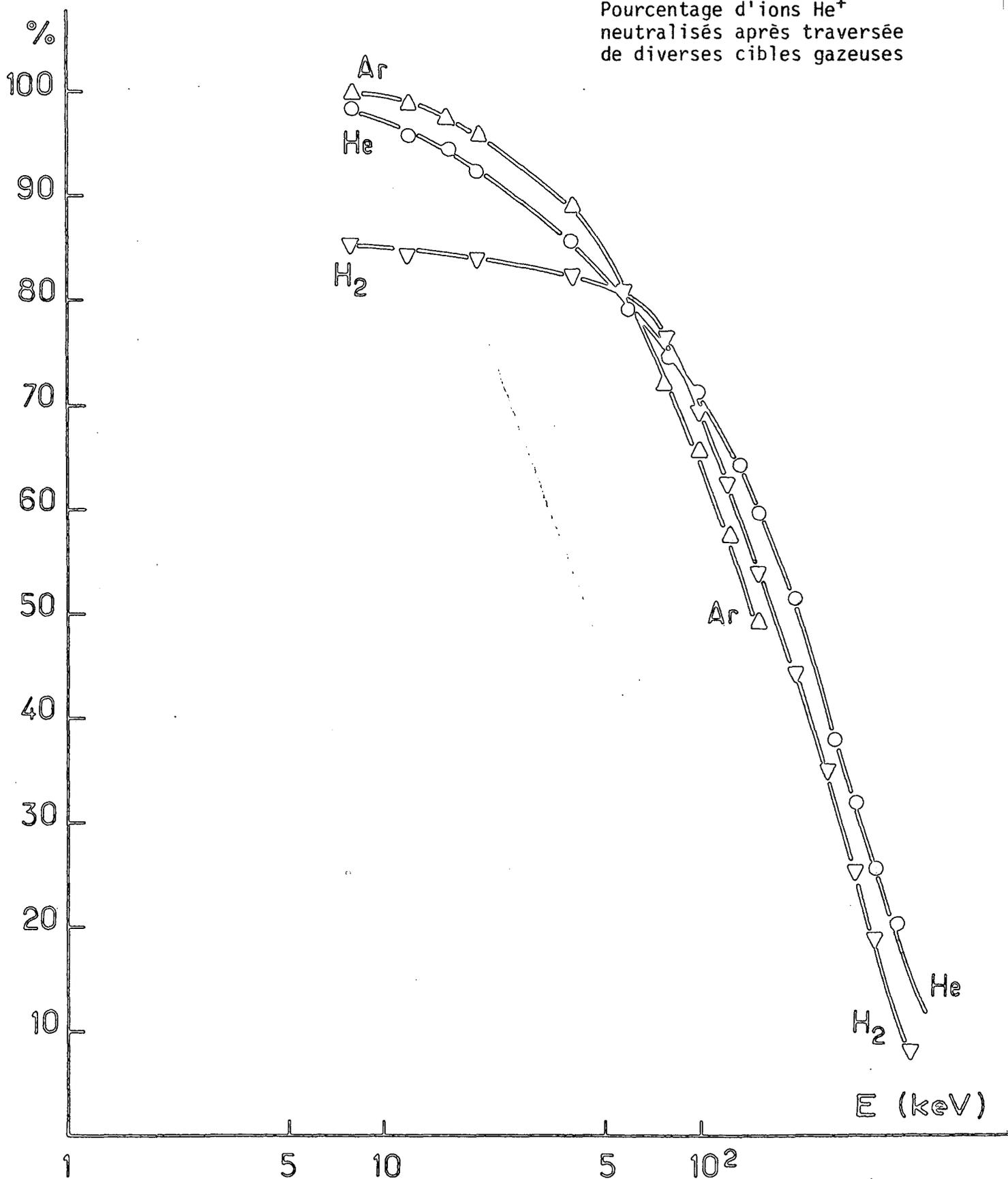


Fig. XVIII a

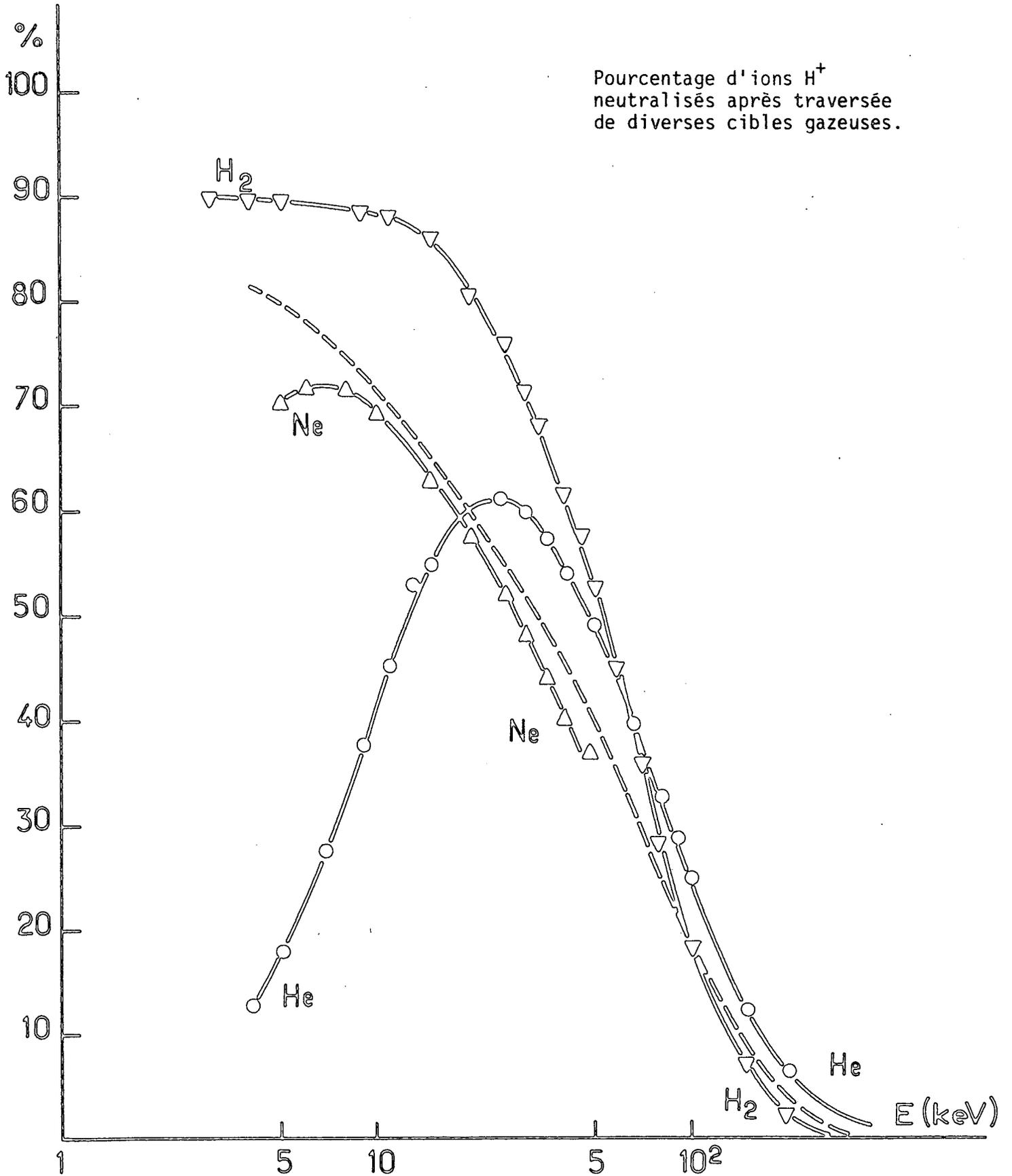


Fig. XVIII b

Nous obtenons ainsi au niveau de la cible B un jet atomique dont l'intensité est de l'ordre de 10^{15} atomes/s et le diamètre dans les meilleures conditions de focalisation de l'ordre de 4 mm (à 45 kev).

c) Détection du jet atomique

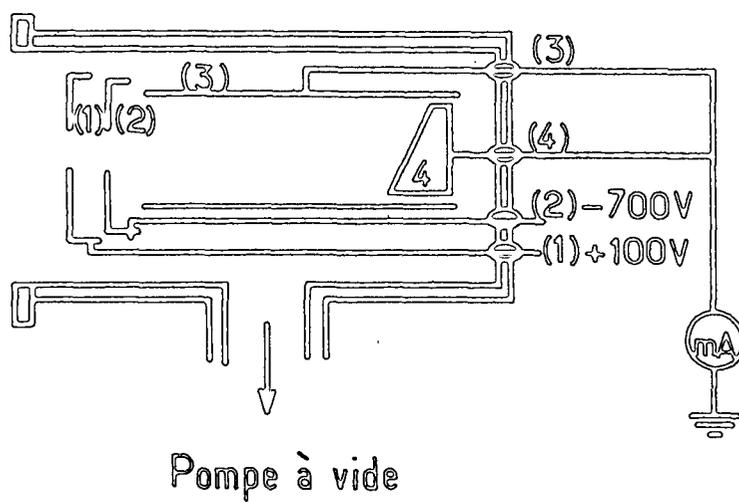
Ce jet est ensuite détecté grâce à un dispositif assez sommaire qui peut fonctionner soit en cage de Faraday pour les ions, soit en dispositif à émission secondaire pour les neutres.

Ce dispositif est représenté sur la figure XIX .

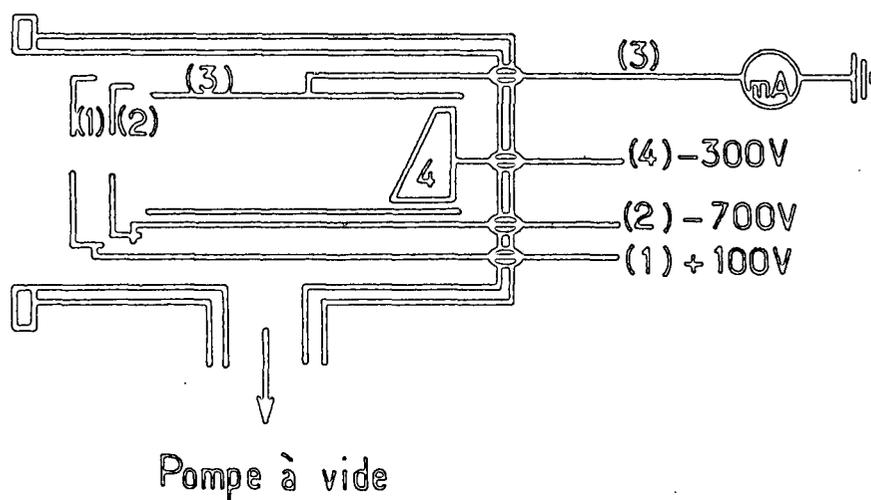
Polarisé comme en a), il permet de mesurer le courant ionique; les électrons secondaires émis lors de la collision avec l'électrode de laiton (4) sont repoussés par le champ électrique en (3) ou (4). Les ions et électrons de basse énergie créés éventuellement lors de collisions avec le gaz de la cellule B sont maintenus hors du détecteur à l'aide du champ créé entre les électrodes (1) et (2).

La figure XIX -b représente le dispositif de détection polarisé pour mesurer le courant électronique secondaire émis par collision du jet sur la cible de laiton (4). Le laiton qui possède un coefficient d'émission secondaire de l'ordre de 6 (rapport du nombre d'électrons émis au nombre d'atomes ou d'ions reçus par la cible) s'avère un alliage tout à fait satisfaisant pour ce genre de détection. Pour calibrer ce détecteur, nous faisons une détermination du coefficient d'émission secondaire des ions par mesure directe du courant ionique, puis du courant d'émission secondaire; nous utilisons ensuite les résultats de STIER et al. (80) qui ont montré que le rapport $\frac{\gamma(\text{He})}{\gamma(\text{He}^+)}$ est pratiquement indépendant de l'énergie du projectile dans le domaine 20-200 kev, et égal à 1,05 ($\frac{\gamma(\text{H})}{\gamma(\text{H}^+)} = 1,1$).

Pour être assuré d'une bonne reproductibilité, il faut d'une part que la surface de laiton ne soit pas contaminée (vapeur d'huile ou autres sources d'oxydation ou de corrosion) et que la pression résiduelle soit de l'ordre de 10^{-6} . Cependant quelles que soient les conditions de fonctionnement ce détecteur reste très sensible et rapide; avant l'utilisation d'alimentations stabilisées, ce signal nous a servi comme signal d'asservissement du jet de manière très satisfaisante.



a) Cage de Faraday



b) Détection des atomes neutres

Fig. XIX

C. Le champ magnétique

a) Homogénéisation, régulation et balayage

L'aimant utilisé est un électroaimant Brüker à entrefer variable. Pour obtenir les résultats présentés ici, nous avons travaillé avec un entrefer de 5 cm (le diamètre des pièces polaires, anneaux de garde exclus est de 20 cm).

Après réglage géométrique du parallélisme des pièces polaires, nous réalisons une carte du champ à l'aide du gaussmètre à résonance magnétique nucléaire. L'homogénéisation est alors progressivement améliorée mécaniquement, puis par utilisation d'anneaux de garde et éventuellement de bobines auxiliaires pour la suppression des gradients axiaux. C'est un réglage très délicat qui doit être refait pour chaque valeur du champ magnétique étudié. L'homogénéité maximale ainsi obtenue dans l'entrefer vide est telle que les écarts relatifs du champ sont inférieurs à 1 ppm dans la zone observée de la cible. Une fois la cellule et toute l'optique mise en place, nous avons cependant constaté une déformation des lignes de champ (malgré une sélection aussi rigoureuse que possible des matériaux utilisés); et c'est ainsi qu'à 8280 G, les inhomogénéités atteignaient 1.5 ppm lors des mesures rapportées dans le chapitre IV.

Lorsque le réglage optimal est obtenu, il n'est valable que pour une étroite zone autour de la valeur pour laquelle il a été réalisé (au plus 200 G) et il y a lieu de ne pas trop modifier la valeur du champ pour lequel il a été obtenu, sous peine de modifier légèrement la position des pièces polaires et la carte du champ. Ceci nous a obligé à maintenir l'aimant réglé en fonctionnement 24 heures sur 24. Pour obtenir une homogénéité supérieure, il nous semblerait indispensable de travailler avec un électroaimant spécialement conçu, à pièces polaires fixes (ou avec un aimant permanent, mais alors les problèmes sont tout autres).

L'alimentation de l'aimant est une alimentation stabilisée à 10^{-5} environ. Nous l'avons utilisée selon les exigences des expériences dans deux types de conditions distinctes. Pour les mesures ne présentant pas un caractère très précis, il suffit d'attaquer la référence de l'alimentation stabilisée par une dent de scie lentement variable pour obtenir un petit balayage du champ dont la linéarité est fonction de la courbe d'aimantation des pièces polaires et dont la constante de temps est essentiellement celle de l'aimant (10 G/mn représente une vitesse de balayage maximale). Pour les mesures nécessitant une plus grande précision, l'alimentation de l'aimant est stabilisée

par une régulation à effet Hall qui assure une stabilité à court terme de 10^{-5} au moins en bas champ, de ± 10 mG en fort champ. Le signal d'erreur est fourni par la différence entre la tension Hall aux bornes de l'échantillon et la tension développée dans un pont de résistances calibrées. Le balayage du champ est obtenu par introduction dans ce pont d'un potentiomètre de grande linéarité mu par un moteur. En dépit de sa thermostation une telle régulation reste extrêmement sensible aux variations de température ambiante. Il en résulte des dérives lentes qu'il y a lieu d'éliminer; nous décrirons dans le paragraphe D la méthode la plus satisfaisante que nous ayons mise au point dans ce but; dans la mesure où elle repose sur le pointé de la résonance nucléaire des protons dans l'eau, c'est ce point particulier, la mesure du champ magnétique, que nous allons aborder maintenant.

b) La mesure du champ magnétique

Le très faible espace disponible à l'intérieur de la cellule d'expérience imposait l'utilisation d'un gaussmètre à résonance magnétique nucléaire des protons dans l'eau. Selon les besoins, nous avons utilisé un certain nombre de gaussmètres de types différents : gaussmètre à pont de type Bloembergen et gaussmètre à oscillateur marginal; c'est sur ce dernier que nous nous arrêterons le plus longtemps, car il présente la plus grande facilité d'emploi, et la plus large gamme de fréquences; toutefois, l'expérience nous a prouvé qu'il était nécessaire de prendre un grand nombre de précautions pour en faire un appareil de mesure de précision. Son principe est bien connu : l'échantillon contenant les protons est placé dans le circuit résonnant d'un autooscillateur au seuil d'accrochage; au passage à résonance, il y a absorption d'énergie par les protons dans l'eau et décroissance du niveau d'oscillation d'autant plus forte que le facteur de qualité du circuit est élevé. La seule difficulté concernant un tel oscillateur consiste à obtenir un régime d'oscillation stable suffisamment bas pour qu'il n'y ait pas saturation totale de l'échantillon étudié. Une telle condition est difficile à réaliser : ainsi pour une substance dont le temps de relaxation est de 20 ms, le niveau d'oscillation de l'oscillateur doit être de l'ordre de 10 mV environ. Ce genre d'exigences n'est jamais réalisé dans les appareils à lampes du commerce et nous allons voir les difficultés qui en résultent.

1°) Gaussmètre à oscillateur local AEG

Prenons par exemple le gaussmètre AEG avec lequel nous avons travaillé; les différents paramètres caractéristiques de cet appareil sont les suivants : la résonance observée est une résonance de protons dans

la glycérine ^(☆) dont, à 25°C, le temps de relaxation transversal T_2 , très peu différent du temps de relaxation longitudinal T_1 , est de l'ordre de 20 ms ⁽⁶⁰⁾. Or l'oscillateur est un oscillateur à triode dont le niveau moyen d'oscillation assez élevé (de l'ordre de 1 volt) réalise une complète saturation de la résonance ($\sqrt{\gamma H_1 T_1 T_2} \sim 20$. H_1 amplitude du champ de radiofréquence), d'où une largeur apparente de raie de l'ordre de 300 mG et un temps de relaxation apparent T_2^* de l'ordre de 1 ms. En corollaire, le signal obtenu dans un balayage lent est très faible : en effet l'oscillateur marginal est sensible, au premier ordre de perturbation, uniquement au signal d'absorption de la résonance magnétique nucléaire, signal dont l'amplitude maximale décroît avec l'intensité du champ de radiofréquence selon la loi ^(☆☆) :

$$\chi_0 H_0 \frac{\gamma H_1 T_2}{1 + (\gamma H_1 T_1 T_2)^2}$$

où χ_0 représente la susceptibilité magnétique de l'échantillon

H_0 le champ magnétique statique

Toutefois, cette difficulté peut être surmontée en utilisant un balayage rapide de la résonance : c'est le cas dans notre appareil où nous modulons le champ magnétique statique H_0 par un champ à 70 Hz: $H_m \sin \Omega t$. Dans ces conditions (voisines de celles du "passage adiabatique rapide"), le signal transitoire obtenu est beaucoup plus intense que le signal stationnaire et présente des "wiggles" très caractéristiques (fig. XXV) liés aux battements entre la fréquence de précession libre ω_0 , et la fréquence d'entraînement ω du champ de radiofréquence.

Toutes ces conditions étant réunies, l'appareil présente des signaux dont le rapport signal sur bruit est très bon ($\gg 20$) dès que $H_0 > 1$ kG et que $H_m \sim 10$ G. Habituellement le pointé d'une telle résonance se fait par

(☆) *Au niveau de précision atteint par cet appareil, l'existence des deux pics de résonance pour les protons liés au carbone et à l'oxygène qui sont respectivement à -0,7 ppm et 0,9 ppm de part et d'autre de la résonance du proton dans l'eau ne présente aucune importance.*

(☆☆) *Cette formule et tous les résultats qui suivent sont des résultats très classiques en résonance magnétique nucléaire. On en trouvera par exemple un exposé très complet dans le livre de A. ABRAGAM ⁽⁸¹⁾.*

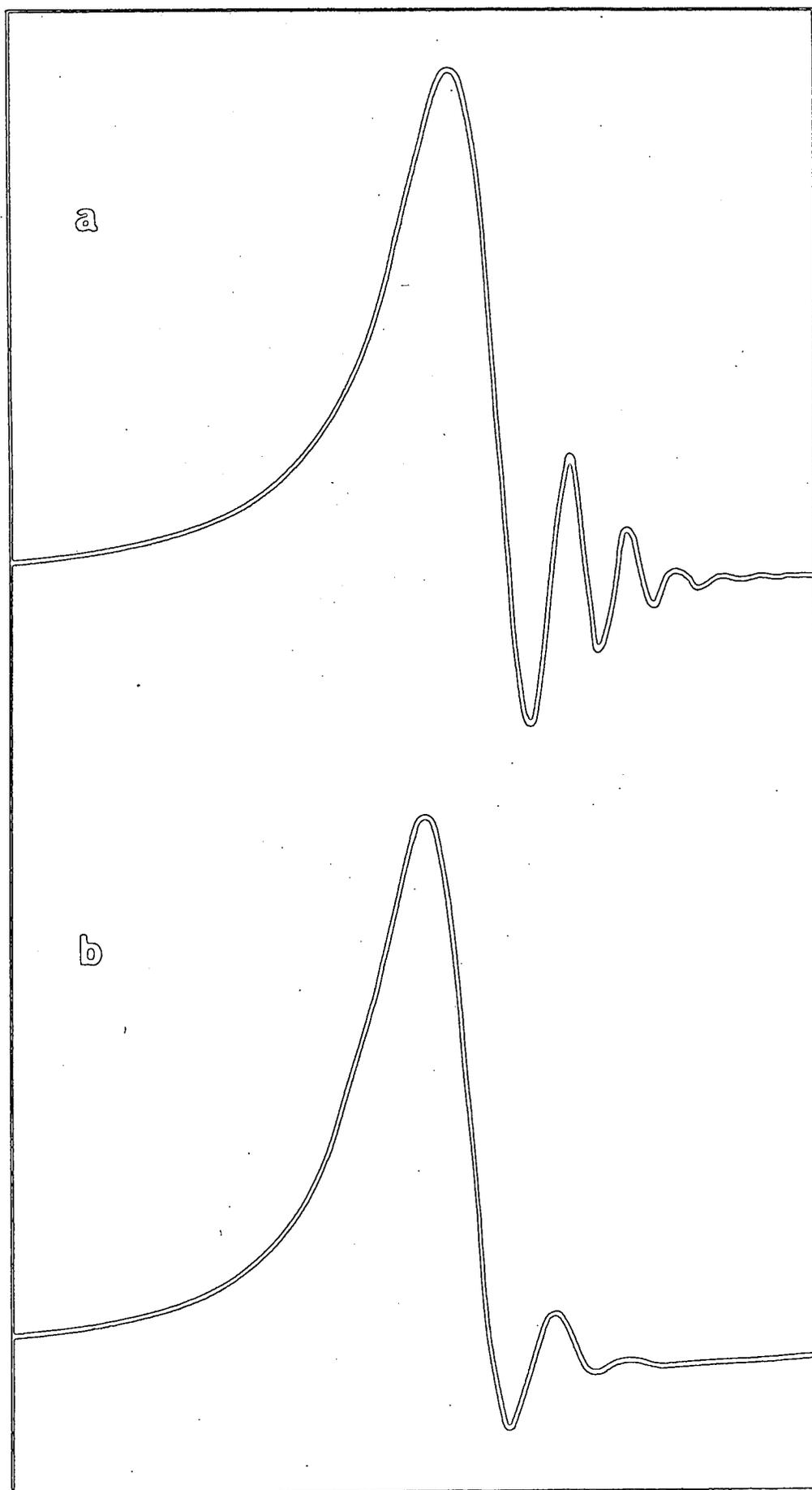


Fig. XX

Courbes de résonance de l'oscillateur AEG

a) champ croissant ($\frac{dH}{dt} > 0$)

b) champ décroissant ($\frac{dH}{dt} < 0$)

superposition des signaux obtenus pendant les deux alternances de la modulation (ou ce qui est équivalent par détection synchrone à 2Ω). Les formes de raies étant particulièrement complexes, le pointé de la résonance avec une bonne précision s'avère très difficile; c'est ainsi que nous avons été amenés, avec certaines sondes, à faire des erreurs de l'ordre de 60 mG par pointé du premier maximum du signal de résonance. L'examen plus approfondi du résultat nous a montré qu'une telle erreur était liée au fait que le signal mesuré est sensible non seulement à χ'' (partie imaginaire de la susceptibilité nucléaire, liée à l'absorption), mais également à χ' (partie réelle liée à la dispersion). Une preuve du mélange absorption-dispersion est donnée sur la figure XX où l'on voit très nettement que l'amplitude des wiggles n'est pas la même selon le sens du balayage du champ. L'étude des équations de la résonance magnétique dans ces conditions transitoires (cf. par exemple B.A. JACOBSON et R.K. WANGSNESS ⁽⁸²⁾) montre que cette asymétrie est une preuve certaine d'une importante contribution dispersive au signal (la forme complexe et dissymétrique, tant des signaux d'absorption que de dispersion, masque ce mélange qui est cependant responsable d'un déplacement du maximum principal de l'ordre du 1/5 de sa largeur).

Cette contribution dispersive au signal est un effet parasite lié à l'existence de déphasages dans l'amplificateur et la boucle de réaction qui constituent l'oscillateur. Ce fait a déjà été mis en évidence et étudié par D.G. HUGHES et M.R. SMITH ⁽⁸³⁾ qui ont montré que la contribution de χ' , normalement au plus de l'ordre de 1%, peut être beaucoup plus importante si le facteur de qualité du circuit n'est pas très élevé. Compte tenu de ces difficultés, nous avons été amenés à réaliser un oscillateur marginal ne présentant pas ces défauts; en résumé, les impératifs étaient donc les suivants :

- très bas niveau d'oscillation pour ne pas saturer l'échantillon et pouvoir travailler en conditions quasi-stationnaires (plus faciles à analyser que les conditions de transitoires avec "wiggles")
- facteur de qualité élevé pour minimiser les effets dispersifs éventuels.

2°) Gaussmètre à oscillateur local "Anderson"

Pour la réalisation du premier impératif, l'essentiel de l'amélioration est apportée par l'utilisation de transistors à effet de champ et de composants à bas bruit. Plusieurs expérimentateurs ont présenté divers types de schémas; nous nous sommes largement inspirés de celui d'ANDERSON ⁽⁸⁴⁾ que nous reproduisons figure XXI. Avec une bobine de résonance de quelques tours

de fil de cuivre et des câbles de faible capacité (1,2 m environ, 30 pF au mètre), un tel oscillateur oscille sans problème jusqu'à 50 MHz. Un ajustement de la longueur du câble permet de monter plus haut en fréquence (jusqu'à 100 MHz).

Il est toutefois indispensable de contrôler sa fréquence au passage à résonance. En effet au passage à résonance l'effet dispersif de la susceptibilité magnétique induit un entraînement de fréquence qui se traduit par un rétrécissement apparent des raies (phénomène très classique que l'on trouvera étudié par exemple dans ROCARD (⁸⁵)). L'expérience nous a montré que l'injection sur l'émetteur commun (point C, figure XXII) d'un très faible signal (quelques μV) délivré par un synthétiseur à quartz, suffisait à faire accrocher l'oscillateur et à le stabiliser au passage à résonance. Nous avons vérifié que le signal de l'autooscillateur restait pur d'harmoniques ou de fréquences parasites et que les raies obtenues par détection synchrone après démodulation étaient parfaitement symétriques. La largeur de raies observées est alors très faible de l'ordre de 10 mG sur de l'eau faiblement dopée ($\text{FeCl}_3 \sim \frac{N}{100}$) (voir figure VII, chap. IV). Dans ces conditions, le mélange absorption-dispersion n'est plus décelable sur la forme de la raie.

Nous ne reviendrons pas sur le problème des erreurs systématiques qui peuvent entâcher de telles mesures de champ et renvoyons à la discussion effectuée sur ce sujet au paragraphe B du chapitre IV.

D. Signaux observés

Dans le travail préparatoire aux résultats rapportés ici, nous avons réalisé des enregistrements de spectres de diverses espèces gazeuses excitées par un jet soit d'hydrogène, soit d'hélium. C'est ainsi que nous avons observé tant en intensité qu'en polarisation les spectres de l'hélium, du néon, de l'hydrogène et de l'azote. Remarquons incidemment que, après de nombreux expérimentateurs (⁸⁶), nous avons effectivement observé de la polarisation sur les raies atomiques de l'hydrogène excité par dissociation moléculaire (⁸⁷), mais que nous n'en avons pas observé sur les raies de l'azote (nous supposons que ceci peut être lié au fait que les raies de l'azote que nous avons pu observer, sont essentiellement les raies du visible et du proche ultra violet; or ces raies sont des raies de fluorescence de niveaux très excités. Il est

vraisemblable que les processus conduisant à l'excitation de tels niveaux sont très nombreux et sont associés à des états moléculaires dissociatifs de symétrie différente, il en résulterait alors une polarisation moyenne des niveaux excités (très faible ou quasi-nulle). Ces spectres, en particulier ceux réalisés sur le néon, ont nécessité une bonne résolution, nous avons utilisé dans ce but un spectromètre Jobin-Yvon HRS (fentes ouvertes à 10μ environ). La faible étendue optique d'un tel montage a nécessité l'utilisation des techniques de comptage de photons et la mise au point d'un ratiomètre digital fournissant directement le taux de polarisation.

Pour l'ensemble des mesures de croisement de niveaux rapportées dans ce mémoire, les signaux de fluorescence ont été isolés par des filtres interférentiels et détectés à l'aide de photomultiplicateurs (refroidis à l'azote obtenu par ébullition forcée d'azote liquide); l'intensité totale des signaux est suffisante pour effectuer une détection analogique.

Pour la plupart des raies du visible, nous avons utilisé un photomultiplicateur EMI 9558 QB; pour la détection de la raie de fluorescence du niveau 2^3P de l'hélium à $1,09 \mu$, une couche S_1 (PM 9102 de RCA) s'est avérée suffisante en dépit de son très faible rendement quantique dans ce domaine.

La modulation du champ magnétique ou de la polarisation de la lumière détectée permet, par l'utilisation d'une détection synchrone, de réduire le spectre de bruit et de mieux le filtrer. En général, il s'est en outre avéré indispensable de moyenner ce signal (durant des laps de temps variant de 1 à 6 heures). Nous avons déjà décrit dans le paragraphe A-d) du chapitre IV le mode d'acquisition des données utilisé pour les mesures sur l'hélium. A quelques nuances près cette technique a également été utilisée pour nos résultats sur le néon; nous nous contenterons donc d'en reprendre la description rapide ici en insistant plus particulièrement sur les aspects techniques.

Reprenons donc le schéma de la figure IX qui représente un cycle d'acquisition de données. Le champ magnétique est balayé linéairement en dents de scie sur une amplitude légèrement supérieure à celle utile (soit à l'aide de la régulation à effet Hall, soit directement grâce à une dent de scie externe). C'est le signal de résonance nucléaire à H_0 du gaussmètre AEG dont la sonde est fixe, extérieure à la cellule qui déclenche le démarrage de l'avance canal du moyeneur et le stockage.

La reproductibilité d'un tel déclenchement dépend essentiellement de la stabilité de l'oscillateur à ν_0 et du rapport signal sur bruit du signal de déclenchement. En ce qui concerne le premier point, nous avons dû mettre au point un contrôle automatique de fréquence pour compenser les dérives en fréquence de l'oscillateur marginal AEG. Le principe en est simple, la fréquence de l'oscillateur est mesurée grâce à un fréquencemètre très rapide dont l'indication est comparée à une indication ν_0 affichée à l'avance; la différence entre ces deux indications est convertie en une tension analogique, puis réinjectée sur une diode "varicap" du circuit de résonance de l'oscillateur, ce qui permet "d'asservir" ainsi la fréquence d'oscillation.

Le signal de déclenchement est obtenu à partir du signal de résonance nucléaire de la sonde externe fixe : une petite bobine auxiliaire permet de réaliser une modulation de faible amplitude (et de basse fréquence 70 Hz) de ce signal. Le signal détecté à la fréquence de balayage a une allure de courbe de dispersion; après mise en forme, il sert de signal de déclenchement du stockage des données dans l'analyseur multicanaux (instant t_0). L'inversion du sens de balayage du champ est commandée à l'instant t_1 après un intervalle de temps $t_1 - t_0 = \tau$ prédéterminé et constant. La durée typique d'un balayage du champ étant de l'ordre de la minute, une telle technique permet l'élimination de l'essentiel des dérives du champ (dont les constantes de temps sont très supérieures à la minute).

Après une intégration suffisante, les résultats numériques sont sortis sous forme digitale. Les signaux de résonance nucléaire servant à étalonner le champ sont alors enregistrés dans les mêmes conditions, la sonde à résonance nucléaire couissant selon $O\vec{u}$ (fig. VI) étant alors positionnée dans la cellule à l'endroit exact d'interaction du jet avec la cible gazeuse. L'ensemble des résultats obtenus est ensuite traité numériquement, les courbes de croisements de niveaux sont ajustées aux courbes théoriques : absorption, dispersion, ou formes de courbes plus compliquées dans le cas de modulation du champ. (cf. fig. VIII).

En conclusion, le montage tel qu'il a été décrit dans ce chapitre (et le chapitre IV) représente dans les grandes lignes l'état actuel d'une expérience qui a beaucoup évolué au cours des trois dernières années. Il est possible que la bonne maîtrise technique de sources d'ions plus lourds permette de trouver des conditions d'excitation plus anisotropes et donc plus favorables aux mesures de croisements de niveaux : comme nous l'avons souligné dans l'introduction, nous n'avons fait qu'explorer cette possibilité qui justifierait vraisemblablement une étude plus approfondie.

QUATRIEME PARTIE

EFFET ZEEMAN DU NEON

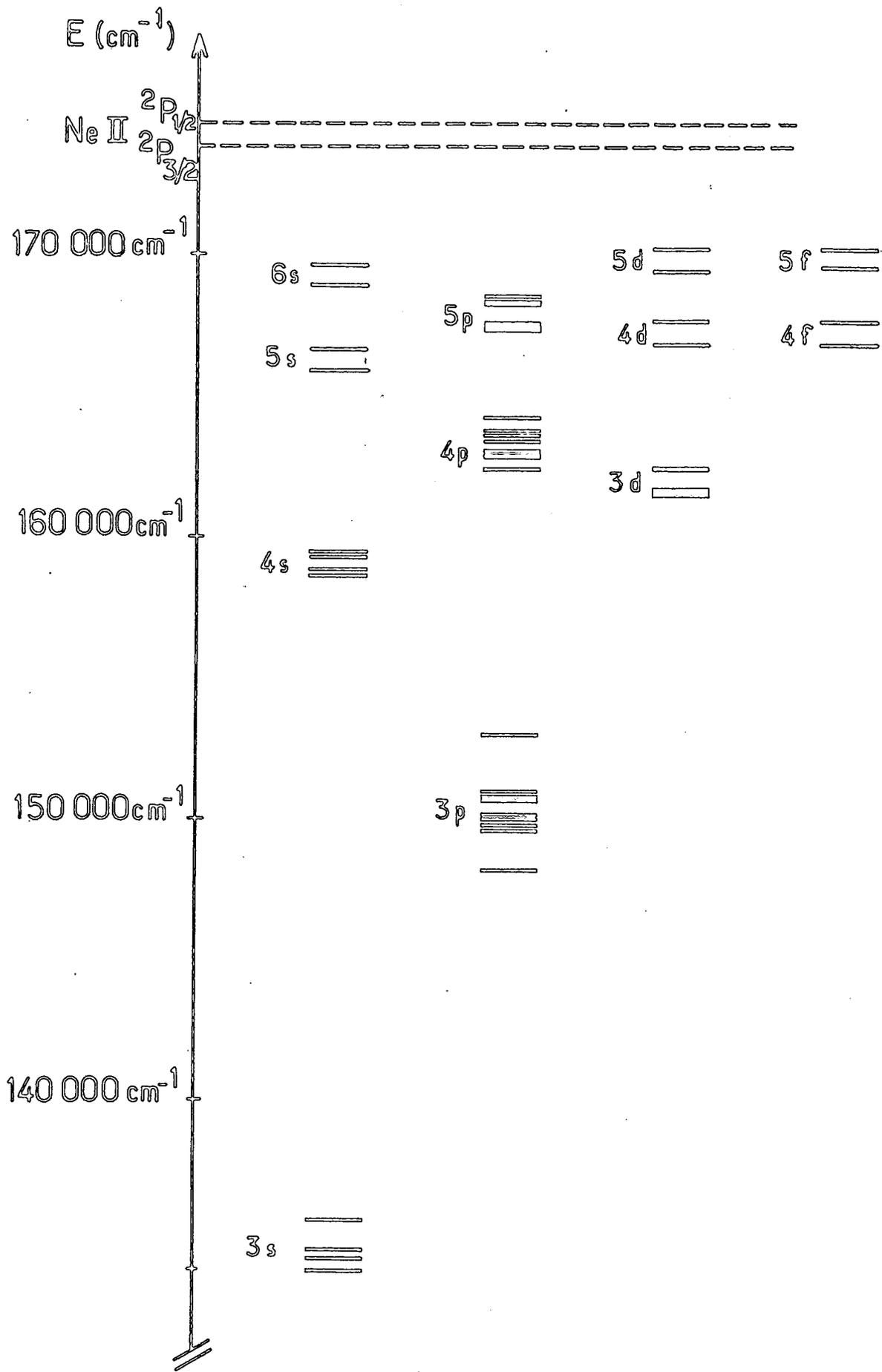


Fig XXXII Configurations excitées du Néon

CHAPITRE VI

EFFET ZEEMAN DE LA CONFIGURATION $2p^5 4d$ DU NEON

Après avoir analysé les résultats que l'on pouvait tirer d'une étude de croisements de niveaux dans un multiplet d'un atome bien connu et montré la qualité des informations que l'on pouvait en extraire, nous avons abordé l'étude d'un système un peu plus complexe.

Le néon nous semblait un système intéressant à double titre :

Mis à part le cas de la configuration $2p^5 3p$, les informations expérimentales sur l'atome excité sont peu nombreuses et ont essentiellement été obtenues par des méthodes de spectroscopie traditionnelle. La première étude extensive du spectre de fluorescence a été réalisée par PASCHEN ⁽⁸⁸⁾, les études d'effet Zeeman par GREEN et al. ⁽⁸⁹⁾ et JACQUINOT ⁽⁹⁰⁾. Nous avons l'espoir que l'utilisation des techniques de croisement de niveaux, qui s'est avérée très intéressante par exemple dans l'étude de la structure hyperfine et de l'effet Zeeman du Néon 21 ⁽⁹¹⁾ puisse apporter une information plus fine sur l'effet Zeeman du Néon 20.

Il est bien clair par ailleurs que les mesures de croisements de niveaux qui constituent un test très sévère tant de la qualité de la détermination des structures fines, que de celle des fonctions d'ondes (facteurs de Landé) ne permettent pas de déterminer simultanément les facteurs de Landé et les structures fines. En ce sens, dans la mesure où la connaissance expérimentale du spectre du Néon est assez bonne (10^{-3} sur les structures fines étudiées) et où le couplage des moments cinétiques était réputé assez proche du couplage de Racah, nous pensions pouvoir obtenir une analyse assez fine de l'effet Zeeman pour en tirer de bonnes valeurs des écarts d'énergie en champ nul ou des facteurs de Landé.

C'est la raison pour laquelle notre intérêt s'est porté tout d'abord sur l'étude des multiplets de la configuration $2p^5 4d$ notés en notation de Paschen ($4d_4 d'_4 - d'_1 d''_1 - s'_1 s''_1 s'''_1 s''''_1$). Ces multiplets sont

bien excités par un jet d'hélium et ils présentent des taux de polarisation en champ nul assez importants de l'ordre de 15%. L'observation de ces multiplets a mis en évidence des résonances dont la largeur est de l'ordre de 1 gauss ce qui prouve que les durées de vie de ces niveaux sont de l'ordre de 50 ns. Munis de ces renseignements, nous avons cherché et trouvé un certain nombre de croisements de niveaux $\Delta m = 2$ des deux doublets $d_4 d'_4$ et $d'_1 d''_1$. L'analyse de ces données s'avère délicate, elle semble prouver en particulier que le couplage réel est vraisemblablement moins proche du couplage de Racah que les études antérieures (essentiellement basées sur la connaissance du spectre d'énergie de la configuration) le laissaient prévoir.

Après un rappel succinct, dans le paragraphe A, des connaissances acquises tant du point de vue expérimental que théorique sur la structure de la configuration $2p^5 4d$ du Néon (niveaux d'énergie, couplage et facteurs de Landé), nous présentons en B nos résultats expérimentaux. Ceux-ci étant inexplicables dans le cadre de l'approximation du § A, nous proposons en C le modèle phénoménologique le plus simple qui permette d'en rendre compte.

Dans le paragraphe D, nous reprenons l'étude paramétrique du § A; nous montrons les améliorations que l'on peut lui apporter et leurs limites.

A. La configuration $2p^5 4d$ du Néon : rappels théoriques et expérimentaux

La description la plus précise des configurations moyennes du Néon, comme celle des gaz rares plus lourds est basée sur l'étude paramétrique des niveaux d'énergie de chaque configuration (LIBERMAN (92) et KOENIG (93)).

Pour préciser nos notations, nous rappelons très brièvement le principe de cette méthode très classique qui repose sur l'hypothèse du champ central (on trouve un exposé détaillé de ces résultats dans tous les ouvrages de référence de spectroscopie, par exemple SLATER (94)).

Le hamiltonien de l'atome dont le noyau est considéré comme infiniment lourd est décomposé selon le schéma suivant :

$$\mathcal{H} = \sum h_i + Q + \Lambda \quad (\text{VI-1})$$

expression dans laquelle h_i représente le hamiltonien de l'électron i dans le champ du noyau :

$$h_i = \frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \quad (\text{VI-2})$$

Q représente la répulsion électrostatique entre électrons :

$$Q = \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{VI-3})$$

Λ prend en compte le hamiltonien spin-orbite, plus éventuellement toutes les autres corrections relativistes du modèle de Pauli.

L'interaction électrostatique Q et le hamiltonien spin-orbite Λ sont évalués sur la base de fonctions propres monoélectroniques d'un hamiltonien de champ central : leur dépendance angulaire est celle des harmoniques sphériques, nous noterons leur partie radiale sous la forme :

$$\psi_{n\ell}(r_i) = \frac{R_{n\ell}(r_i)}{r_i} \quad (\text{VI-4})$$

avec

$$\int \psi_{n\ell}(r) \psi_{n'\ell'}(r) dr = \delta(n, n')$$

Le principe de la méthode paramétrique consiste alors à évaluer dans cette hypothèse de champ central la forme angulaire des interactions électrostatiques et magnétiques en considérant les intégrales radiales comme des paramètres ajustables. La détermination de ces paramètres se fait alors par ajustement entre le spectre expérimental et les niveaux d'énergie calculés.

Le calcul de l'énergie des niveaux excités nécessite l'évaluation des interactions Q et Λ sur une base de fonctions propres à n électrons constituées à partir de produits de fonctions monoélectroniques correctement antisymétrisés (principe de Pauli). En pratique, la démarche la plus commode consiste à reporter les effets de l'antisymétrisation sur l'opérateur décrivant l'interaction et c'est ainsi que l'on est amené à étudier des opérateurs biélectroniques effectifs directs et d'échange agissant sur une base de fonctions propres non antisymétrisées (c'est-à-dire produits simples de fonctions monoélectroniques).

Compte tenu de la symétrie centrale du problème, la base qui s'impose pour la description des opérateurs d'interaction est celle des opérateurs tensoriels irréductibles. Il est en particulier fait grand usage des opérateurs tensoriels mixtes notés $\omega^{(kK)}$ qui sont des opérateurs tensoriels d'ordre k par rapport aux variables ψ_{spin} , et K par rapport aux variables orbitales (95).

La dernière simplification à mettre en oeuvre pour l'étude des configurations excitées des gaz rares consiste à ramener l'étude d'une configuration $p^5n\ell$ à celle de la configuration complémentaire $p\ell$ d'un atome à deux électrons par utilisation du théorème de Racah (⁹⁶). Celui-ci stipule que l'élément de matrice réduit de l'opérateur $\omega_{(m-\epsilon)}^{(kK)}$ symétrique dans l'échange des $m - \epsilon$ électrons équivalents d'une couche incomplète est relié à l'opérateur complémentaire symétrique dans l'échange des ϵ électrons de la configuration complémentaire [★]). Dans le cas du néon, on a :

$$\langle p^5n\ell || \omega_p^{(kK)} || p^5n\ell \rangle = (-1)^{k+K+1} \langle p\ell || \omega_p^{(kK)} || p\ell \rangle$$

Le problème est ainsi réduit à celui d'un atome à deux électrons et il ne reste plus qu'à évaluer les divers comportements angulaires des interactions électrostatiques et magnétiques sur une base appropriée : c'est ce choix que nous allons maintenant expliciter.

a) L'ordre de grandeur des interactions et la nature du couplage

1°) l'interaction électrostatique

Soient $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{s}_1, \vec{s}_2$ les moments cinétiques orbitaux et de spin des deux électrons, $\vec{L}, \vec{S}, \vec{J}$ les moments cinétiques totaux; l'interaction électrostatique commute avec L, S, J, J_z ; elle est donc diagonale ^{★★}) dans le schéma de couplage $|(LS) J M_J \rangle$. Nous rappelons pour mémoire les notations de Slater consacrées par l'usage : après développement de l'interaction électrostatique entre électrons sur la base des opérateurs monoélectroniques C_i^k tels qu'ils ont été définis au chapitre III, on peut mettre les éléments de matrice de l'interaction électrostatique dans des configurations à deux électrons sous la forme :

★) Dans l'absolu, cette relation n'est pas vraie pour les opérateurs de rang nul ($k = K = 0$). Il en résulte l'introduction dans le spectre de déplacements globaux des configurations les unes par rapport aux autres dont il n'y a lieu de tenir compte que dans l'étude simultanée de plusieurs configurations.

★★) Elle n'est par contre pas diagonale en n_a, n_b et est responsable de l'interaction de configuration. L'expression (VI-5) montre bien que l_a et l_b ne sont pas exactement des bons nombres quantiques.

$$\begin{aligned}
\langle n_a l_a, n_b l_b \text{ LSJM} | Q | n_a l_a, n_b l_b' L' S' J' M' \rangle = \\
\delta_{MM'} \delta_{JJ'} \delta_{LL'} \delta_{SS'} e^{i \sum_k (-1)^{L+l_a+l_b} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_b & L \\ l_b' & l_a & k \end{matrix} \right\}} \langle l_a || C^k || l_a \rangle \langle l_b || C^k || l_b' \rangle R^k(ab, ab') \\
+ (-1)^{S+L} (-1)^{L+l_a+l_b} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_b & L \\ l_a & l_b' & k \end{matrix} \right\} \langle l_a || C^k || l_b' \rangle \langle l_b || C^k || l_a \rangle R^k(ab, b'a)
\end{aligned}
\tag{VI-5}$$

Les intégrales radiales R^k sont définies dans le tableau VI-1.

L'élément diagonal de l'interaction électrostatique est noté conventionnellement $\star)$:

$$\langle n_a l_a n_b l_b \text{ LSJM} | \frac{Q}{e^2} | n_a l_a n_b l_b \text{ LSJM} \rangle = \sum_k f_k(l_a l_b L) F^k(a, b) + (-1)^S g_k(l_a l_b L) G^k(a, b)
\tag{VI-6}$$

les intégrales F^k et G^k sont des cas particuliers des intégrales R^k ; nous les avons de même explicitées dans le tableau VI-1.

Toute la dépendance angulaire de l'expression (VI-6) est contenue dans les facteurs f_k et g_k qui s'écrivent dans une configuration à deux électrons :

$$f_k(l_a l_b L) = (-1)^{L+l_a+l_b} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_b & L \\ l_b & l_a & k \end{matrix} \right\} \langle l_a || C^k || l_a \rangle \langle l_b || C^k || l_b \rangle
\tag{VI-7}$$

$$g_k(l_a l_b L) = (-1)^{k+l_a+l_b} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_b & L \\ l_a & l_b & k \end{matrix} \right\} \langle l_a || C^k || l_b \rangle^2
\tag{VI-8}$$

L'application du théorème de Racah au terme d'échange pose quelques difficultés formelles, car (VI-8) ne se présente pas comme l'élément de matrice réduit d'un opérateur tensoriel; il est nécessaire de faire un réarrangement de ce terme, réarrangement que l'on trouvera explicité en détail dans la thèse de B. DECOMPS ⁽⁹⁷⁾. Moyennant quoi l'expression explicite des f_k et g_k dans des configurations de la forme $n_a l_a^{m-1} n_b l_b$ s'écrit :

$\star)$

Sous la forme (VI-6), on retrouve clairement la levée de dégénérescence entre états triplets et singulets liée à la différence de valeur moyenne de la répulsion électrostatique entre les électrons dans les états symétriques ou antisymétriques.

TABLEAU VI-1

Intégrales radiales intervenant dans l'expression de l'énergie électrostatique

$$R^k(ab, cd) = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \mathcal{R}_a(r_1) \mathcal{R}_b(r_2) \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} \mathcal{R}_c(r_1) \mathcal{R}_d(r_2)$$

$$F^k(a, b) = R^k(ab, ab)$$

$$G^k(a, b) = R^k(ab, ba)$$

Dénominateurs des intégrales de Slater : $F_k = \frac{F^k}{D_k}$

| | | | |
|-----------------|-------------------|-------------------|-----|
| $D_1(s, p) = 3$ | $D_2(p, p) = 25$ | $D_2(d, d) = 49$ | ... |
| $D_2(s, d) = 5$ | $D_2(p, d) = 15$ | $D_4(d, d) = 441$ | |
| $D_3(s, f) = 7$ | $D_3(p, d) = 245$ | | |

$$f_k(\ell_a^{m-1} \ell_b \ell_a^{m-1} \ell_b' L) = (-1)^{L+1} \begin{Bmatrix} \ell_a & \ell_b & L \\ \ell_b' & \ell_a & k \end{Bmatrix} [\ell_a] [\ell_b]^{1/2} [\ell_b']^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_a & k & \ell_a \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_b & k & \ell_b' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-9})$$

$$g_k(\ell_a^{m-1} \ell_b \ell_a^{m-1} \ell_b' L) = -\frac{m}{2} \delta(\ell_b \ell_b') \begin{pmatrix} \ell_a & k & \ell_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 + 2 \frac{\delta(S,0)\delta(k,L)}{2k+1} [\ell_a] [\ell_b]^{1/2} [\ell_b']^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_a & k & \ell_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_a & k & \ell_b' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-10})$$

Munis de ces expressions, nous pouvons calculer la dépendance angulaire de l'interaction électrostatique dans chaque configuration et entre configurations excitées : la matrice de cette interaction est explicitée dans l'appendice IV (en couplage (LS) et en couplage (JK)).

Outre la forme explicite de l'interaction, la conclusion essentielle de ce paragraphe est le fait qu'à une interaction électrostatique prépondérante est associé un couplage des moments angulaires de type Russell-Saunders

(L S)J . Ce fait est bien vérifié pour l'hélium qui est un atome léger, mais lorsque l'on passe au néon, dans les configurations moyennement ou très excitées, l'influence des effets relativistes (interaction spin-orbite) devient prépondérante et le schéma de couplage s'écarte considérablement du couplage LS. C'est ce point que nous abordons en rappelant très rapidement la symétrie de l'interaction spin-orbite.

2° interaction spin-orbite

Lorsque Z croît, le terme prépondérant des interactions magnétiques est l'interaction spin-orbite directe :

$$\Lambda = \sum_i \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \quad (\text{VI-11})$$

Soient \vec{j}_1 et \vec{j}_2 les moments cinétiques des électrons (1) et (2). L'interaction spin-orbite est diagonale sur la base couplée $|j_1 j_2 J M\rangle$; la force de l'interaction est mesurée par la valeur des intégrales radiales :

$$\zeta_{\ell_i} = \int R_{n_i \ell_i} \xi(r) R_{n_i \ell_i} dr$$

TABLEAU VI-2

(d'après LIBERMAN (92))

Valeurs expérimentales et calculées des énergies et des facteurs de Landé dans les configurations impaires

| Niveaux | E_{exp} (cm^{-1}) | E_{calc} (cm^{-1}) | g_{exp} | g_{calc} |
|--------------------------------|---------------------------------------|--|------------------|-------------------|
| 5s [3/2] 2 | 165830,144 | 165830,29 | 1,492 | 1,500 |
| 5s [3/2] 1 | 165914,756 | 165914,60 | 1,207 | 1,208 |
| 5s' [1/2] 0 | 166608,309 | 166608,10 | | |
| 5s' [1/2] 1 | 166658,484 | 166658,69 | 1,295 | 1,292 |
| 4d [1/2] 0 | 166969,639 | 166969,40 | | |
| 4d [1/2] 1 | 166977,321 | 166977,58 | 1,391 | 1,393 |
| 4d' ₄ - 4d [7/2] 4 | 167002,007 | 167002,00 | 1,251 | 1,250 |
| 4d ₄ - 4d [7/2] 3 | 167003,104 | 167003,30 | 1,040 | 1,036 |
| 4d [3/2] 2 | 167013,535 | 167013,30 | 1,322 | 1,325 |
| 4d [3/2] 1 | 167028,957 | 167028,91 | 0,812 | 0,809 |
| 4d'' ₁ - 4d [5/2] 2 | 167049,580 | 167049,98 | 0,990 | 0,966 |
| 4d' ₁ - 4d [5/2] 3 | 167050,639 | 167050,25 | 1,248 | 1,261 |
| 4d' [5/2] 2 | 167796,939 | 167796,91 | 0,783 | 0,767 |
| 4d' [5/2] 3 | 167797,865 | 167797,86 | 1,116 | 1,119 |
| 4d' [3/2] 2 | 167798,914 | 167799,23 | 1,230 | 1,275 |
| 4d' [3/2] 1 | 167809,722 | 167809,65 | 0,797 | 0,798 |

Paramètres des configurations impaires (valeurs en cm^{-1})

| Paramètres | $2p^5$ (5s + 4d) | Paramètres | $2p^5$ (5s + 4d) |
|----------------|----------------------|-----------------------|---------------------|
| A | $167275,99 \pm 0,19$ | S | $-1118,09 \pm 0,47$ |
| F ₂ | $6,99 \pm 0,06$ | G' ₁ | $67,16 \pm 0,34$ |
| G ₁ | $1,74 \pm 0,04$ | ζ'_{2p} | $519,71 \pm 0,37$ |
| G ₃ | $0,08 \pm 0,02$ | J | $-20,5 \pm 2,5$ |
| ζ_{2p} | $520,03 \pm 0,15$ | K | $-4,17$ (fixé) |
| ζ_{nd} | fixé à 0 | $\overline{\Delta E}$ | 0,34 |

Or, dans le néon et les gaz rares plus lourds pour toutes les configurations $2p^5nd$ moyennes ou très excitées, la valeur relative des différents paramètres radiaux des interactions magnétiques et électrostatiques vérifie bien la séquence d'inégalités :

$$\zeta_p \gg F^k \gg G^k, \zeta_d \quad (\text{VI-12})$$

La force du couplage spin-orbite du coeur fait que le moment cinétique \vec{j}_1 du trou est un bon nombre quantique. L'interaction électrostatique directe, tout en perturbant très légèrement ce couplage, a pour effet essentiel de coupler fortement les moments cinétiques orbitaux; dans la somme de ces deux interactions le moment cinétique \vec{K} résultant du couplage de \vec{j}_1 et \vec{l}_2 reste une constante du mouvement.

Les interactions électrostatiques d'échange et le spin-orbite de l'électron externe apportent enfin d'ultimes corrections au schéma de couplage jK (couplage introduit par Racah) [en clair $\left((l_1 s_1) j_1 l_2 \right) K s_2 \left. \right] J$].

b) Résultats de la méthode paramétrique. Comparaison aux résultats expérimentaux

Comme nous le rappelions dans l'introduction de ce paragraphe, la méthode paramétrique consiste à expliciter l'ensemble des dépendances angulaires des interactions électrostatiques et magnétiques et à ajuster les paramètres radiaux à l'aide d'un critère expérimental : en général le spectre d'une configuration. C'est ce que S. LIBERMAN ⁽⁹²⁾ a fait pour un certain nombre de configurations des gaz rares : nous donnons dans le tableau VI-2 ses résultats pour la configuration $2p^54d$ du néon qui nous intéresse (les matrices des dépendances angulaires de l'interaction électrostatique et de l'interaction spin-orbite sont reportées respectivement en Appendices IV et V).

Les paramètres électrostatiques sont définis à une constante additive près prise en compte par les constantes A (pour la configuration $2p^54d$) et S (pour la configuration $2p^55s$). Ils sont normalisés pour qu'il n'apparaisse pas de dénominateurs dans les coefficients angulaires des divers termes de l'interaction électrostatique explicités dans l'appendice IV (nous avons noté, dans le tableau VI-1, les dénominateurs usuellement utilisés pour les intégrales de Slater). Les paramètres d'interaction entre configurations ont pour définition :

$$J = \frac{1}{5} R^2 (2p, 5s; 2p, 4d) \quad (\text{intégrale directe})$$

$$K = \frac{1}{3} R^1 (2p, 5s; 4d, 2p) \quad (\text{intégrale d'échange})$$

TABLEAU VI-3

fonctions propres des configurations $2p^5 4d + 2p^5 5s$ d'après LIBERMAN (99)

J = 0

| | | (1/2, 1/2) | (3/2, 1/2) |
|-----|-----------|------------|---------------------|
| 5s' | $[1/2]_0$ | 0,9935 | 0,0065 [☆] |
| 4d | $[1/2]_0$ | 0,0065 | 0,9935 |

J = 1

| | | (3/2, 3/2) | (1/2, 1/2) | (3/2, 1/2) | (3/2, 3/2) | (1/2, 3/2) |
|-----|-----------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| 5s | $[3/2]_1$ | 0,9924 | 0,0073 | 0,0001 [☆] | 0,0002 [☆] | 0,0001 [☆] |
| 5s' | $[1/2]_1$ | 0,0074 [☆] | 0,9866 | 0,0059 [☆] | 0,0001 [☆] | |
| 4d | $[1/2]_1$ | | 0,0061 | 0,938 | 0,0554 | 0,0006 |
| 4d | $[3/2]_1$ | 0,0002 | 0,0001 [☆] | 0,0559 [☆] | 0,9422 | 0,0018 |
| 4d' | $[3/2]_1$ | 0,0001 | | 0,0002 [☆] | 0,0021 [☆] | 0,9976 |

J = 2

| | | (3/2, 3/2) | (3/2, 3/2) | (3/2, 5/2) | (1/2, 5/2) | (1/2, 3/2) |
|-----|-----------|------------|---------------------|------------|---------------------|---------------------|
| 5s | $[3/2]_2$ | 0,9996 | 0,0003 [☆] | | | 0,0001 [☆] |
| 4d | $[3/2]_2$ | 0,0003 | 0,9959 | | | 0,0037 |
| 4d | $[5/2]_2$ | | | 0,9988 | 0,0012 [☆] | |
| 4d' | $[5/2]_2$ | | | 0,0019 | 0,9981 | |
| 4d' | $[3/2]_2$ | 0,0001 | 0,0037 [☆] | | 0,0007 | 0,9955 |

J = 3 + 4

| | | (3/2, 7/2) | (3/2, 7/2) | (3/2, 5/2) | (1/2, 5/2) |
|-----|-----------|------------|------------|---------------------|------------|
| 4d | $[7/2]_4$ | 1 | | | |
| 4d | $[7/2]_3$ | | 0,9999 | 0,0001 [☆] | |
| 4d | $[5/2]_3$ | | 0,0001 | 0,9987 | 0,0012 |
| 4d' | $[5/2]_3$ | | | 0,0012 [☆] | 0,9988 |

Les coefficients tabulés représentent le carré des composantes de chaque état propre sur la base (j, K). Les coefficients dotés de [☆] correspondent à des composantes négatives.

Comme on peut le constater par l'examen du tableau VI-2, l'accord pour le spectre entre les résultats du calcul de Liberman et les valeurs expérimentales compilées au N.B.S. (⁹⁸) est très bon; l'examen des vecteurs propres (tableau VI-3, d'après LIBERMAN (⁹⁹)) montre que le couplage (jK) est un couplage presque pur. [Les résultats d'un calcul Hartree-Fock (¹⁰⁰) de même que ceux de calculs utilisant un potentiel central paramétrique (KLAPISCH) conduisent à la même conclusion .]

Cependant, l'examen plus approfondi du spectre montre bien que si la position moyenne de chaque niveau est dans l'ensemble assez bonne, les petits intervalles de structure fine (d'_4-d_4 ; $d'_1-d''_1$) que nous nous proposons de mesurer par croisement de niveaux sont mal prédits par le calcul : dans un premier temps, nous avons supposé que cet effet, petit devant l'étendue de la configuration, était tout simplement lié à l'absence dans le modèle de Liberman de l'interaction spin-orbite de l'électron externe.

En conclusion, dans la mesure où le couplage (jK) de cette configuration semble presque pur, l'étude de l'effet Zeeman à l'intérieur des multiplets bien isolés $d_4d'_4$ [(3/2, 7/2; 3) et (3/2, 7/2; 4)] et $d'_1-d''_1$ [(3/2, 5/2; 3) et (3/2, 5/2; 2)] semble a priori se réduire en première approximation à un problème à deux niveaux et c'est sous cet angle que nous l'avons abordé pour avoir une première estimation de la position des croisements de niveaux.

c) Effet Paschen-Back des niveaux $d_4d'_4$, $d'_1d''_1$. Prévission de la position des croisements de niveaux observables

1^o) Approximation phénoménologique d'un système à deux niveaux

Notre première approche du problème est une approche semi-phénoménologique de l'étude de l'effet Paschen-Back d'un système à deux niveaux dans laquelle nous avons introduit les écarts d'énergie en champs nuls rapportés par C.E. MOORE (⁹⁸) et les facteurs de Landé déterminés par GREEN et al. (⁸⁹). Ceci nous a donné une première prévision sur la position des croisements $\Delta m = 2$ que nous étions susceptibles de mesurer : nous la rapportons dans le tableau VI-4 (1ère colonne).

2^o) Amélioration des fonctions d'onde

Nous avons essayé d'améliorer notre estimation en utilisant les résultats de LIBERMAN. Compte tenu du très grave désaccord entre les déterminations théoriques des structures fines et les résultats expérimentaux (20% sur

$d'_4 d_4$, 400% sur $d'_1 d''_1$), il était évidemment exclus d'utiliser ces résultats pour obtenir une prévision raisonnable des croisements de niveaux. Dans la mesure où les facteurs de Landé calculés dans le modèle de Liberman semblaient en accord assez satisfaisant avec les résultats expérimentaux de GREEN, nous avons pensé que la qualité des fonctions d'onde en champ nul de LIBERMAN était assez satisfaisante. Introduisant a priori le spectre expérimental des niveaux d'énergie en champ nul, nous avons alors calculé l'effet Zeeman sur cette nouvelle base : les résultats de ce deuxième calcul sont reportés dans la deuxième colonne du tableau VI-4 (les matrices Zeeman sont reportées dans l'appendice VI). Comme on peut le constater, l'introduction de fonctions d'onde a priori plus satisfaisantes et le calcul sur une base non tronquée modifient faiblement la position des croisements pour le multiplet $d_4 d'_4$ pour lequel le couplage (jK) est très pur, un peu plus fortement pour les niveaux $d'_1 d''_1$. Munis de cette estimation, nous avons alors commencé la recherche expérimentale des croisements de niveaux

TABLEAU VI-4

Premières estimations de la position des croisements de niveaux

| | | Système à deux niveaux α | Approximation β |
|--------------|----------------|---------------------------------------|--------------------------|
| | | H_c (en Gauss) | H_c (en Gauss) |
| $d'_4 d_4$ | d'_4 d_4 | | |
| | M' M | | |
| | 4 2 | 8185 | 8179 |
| | 3 1 | 9015 | 9026 |
| | 2 0 | 9946 | 9988 |
| | 1 -1 | 10984 | 11051 |
| | 0 -2 | 12132 | 12232 |
| -1 -3 | 13387 | 13523 | |
| $d''_1 d'_1$ | d''_1 d'_1 | | |
| | M'' M' | | |
| | -1 -3 | 8448 | 8243 |
| | 0 -2 | 9548 | 9500 |
| | 1 -1 | 10775 | 10980 |
| 2 0 | 12161 | 12728 | |

Dans une phase préparatoire, nous avons réalisé un spectre du néon excité par faisceau d'hélium ou d'hydrogène. (Ce spectre a été réalisé à l'aide d'un monochromateur Jobin Yvon HRS ouvert à 10 μ .) L'intensité des raies de fluorescence qui nous concernent plus particulièrement a été reportée sur le tableau VI-5. Ces intensités comptées en nombre de photons par minute ont été obtenues avec des flux approximativement égaux d'hydrogène (à 25 keV) ou d'hélium (à 50 keV)

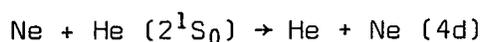
TABLEAU VI-5

| Transitions observées (le moment cinétique total du niveau est indiqué entre parenthèses) | λ (Å) | Intensités mesurées (nb de photons/mn) | |
|--|---------------|--|----------------------|
| | | excitation par H | excitation par He |
| $4d'_4(4) \ 4d_4(3) \rightarrow 2p_9(3)$ | 5764 Å | $30 \cdot 10^3$ | $56 \cdot 10^3$ |
| $4d''_1(2), \ 4d'_1(3) \rightarrow 2p_9(3)$ | 5748 Å | $9 \cdot 10^3$ | $15 \cdot 10^3$ |
| $4d''_1(2), \ 4d'_1(3) \rightarrow 2p_8(2)$ | 5804 Å | $5 \cdot 10^3$ | $6 \cdot 10^3$ |
| $4d''_1(2), \ 4d'_1(3) \rightarrow 2p_6(2)$ * | 5974 Å | $24 \cdot 10^3$ | $30 \cdot 10^3$ |

★

Cette raie, et celle très intense à 5975 Å (transition $2p_5 \rightarrow 1s_5$), n'étant pas bien résolues, il existe une ambiguïté sur l'intensité relative de cette transition.

L'excitation par faisceau d'hélium apparaît plus favorable que l'excitation par faisceau d'hydrogène, fait qui peut être dû à l'existence d'une collision quasi résonnante avec des atomes métastables du jet



La fluorescence des multiplets $d_4d'_4$ et $d''_1d'_1$ a par la suite été isolée par des filtres interférentiels de largeur de bande comprise entre 10 et 20 Å.

La fluorescence du multiplet $d_4d'_4$ a exclusivement été observée sur la raie 5764 Å ($4d'_4 (J=4), \ 4d''_4 (J=3) \rightarrow 2p_9 (J=3)$), celle du multiplet

Fig. -XXIV a

Effet Hanle

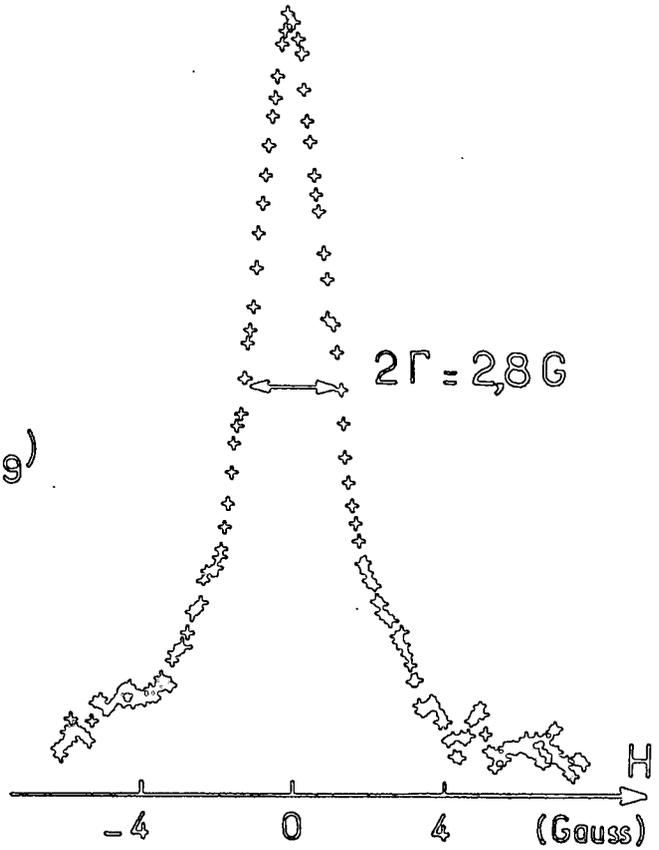
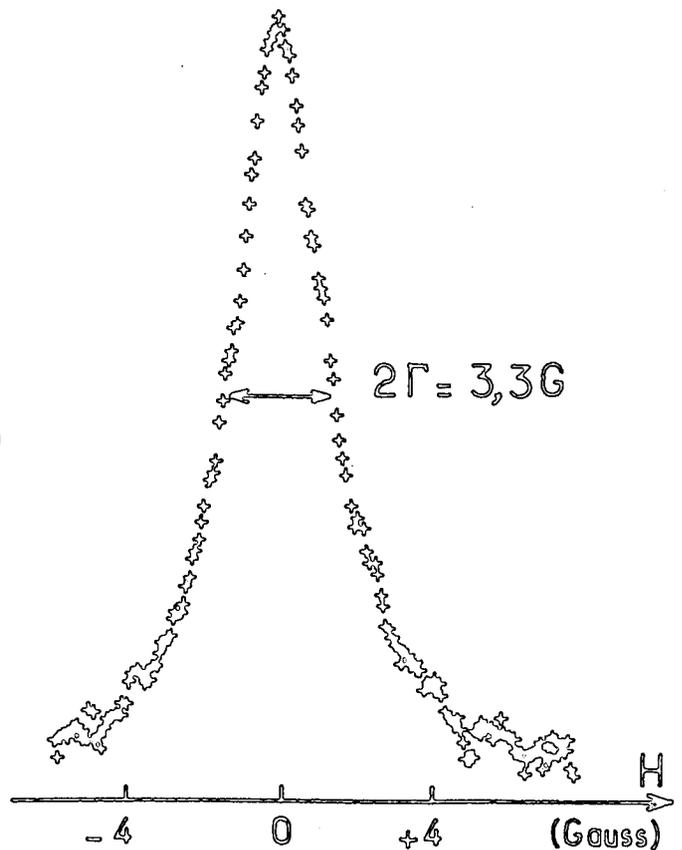
niveaux $4d_{3/2}$ ($J=3$) $4d'_{3/2}$ ($J=4$)raie 5764 \AA ($4d_{3/2}, 4d'_{3/2} \rightarrow 2p_g$) $\tau = 1 \text{ s}$ 

Fig. -XXIV b

Effet Hanle

niveaux $4d'_{1/2}$ ($J=3$) $4d''_{1/2}$ ($J=2$)raie 5748 \AA ($4d'_{1/2}, 4d''_{1/2} \rightarrow 2p_g$) $\tau = 1 \text{ s}$ 

$d_1 d''_1$ sur les raies à 5748 Å ($4d''_1 (J=2)$, $4d'_1 (J=3) \rightarrow 2p_9 (J=3)$), 5974 Å ($4d''_1(2)$, $4d'_1(3) \rightarrow 2p_6(J=2)$) et 5906 Å ($4d''_1(2) \rightarrow 2p_7(J=1)$) [☆] .

a) Effet Hanle

Pour obtenir une estimation de la durée de vie des niveaux et par suite de la largeur présumée des croisements de niveaux, nous avons tout d'abord réalisé des expériences de croisement de niveaux en champs nuls pour les deux multiplets (effet Hanle).

Par cette expérience, nous n'entendons déterminer qu'un ordre de grandeur de la durée de vie des niveaux, car nous n'avons absolument pas étudié le problème des cascades, ni même séparé l'effet des deux niveaux de chaque doublet.

Comme nous le montrons sur la figure XXIV, les croisements de niveaux en champ nul présentent une demi-largeur de l'ordre de 1.4 G pour le multiplet $d_4 d'_4$ et 1.6 G pour le multiplet $d'_1 d''_1$, ce qui conduit à une estimation de la durée de vie de ces niveaux de l'ordre de 50 ns (multiplet $d'_4 d_4$) et 60 ns (multiplet $d'_1 d''_1$), valeurs qui sont en accord avec les résultats théoriques de P.F. GRUZDEV et A.V. LOGINOV (¹⁰¹) et en désaccord notable avec le seul résultat expérimental porté à notre connaissance (c'est celui de KLOZE (¹⁰²) qui estime la durée de vie du niveau $4d'_1$ à 480 ns).

b) Les croisements de niveaux

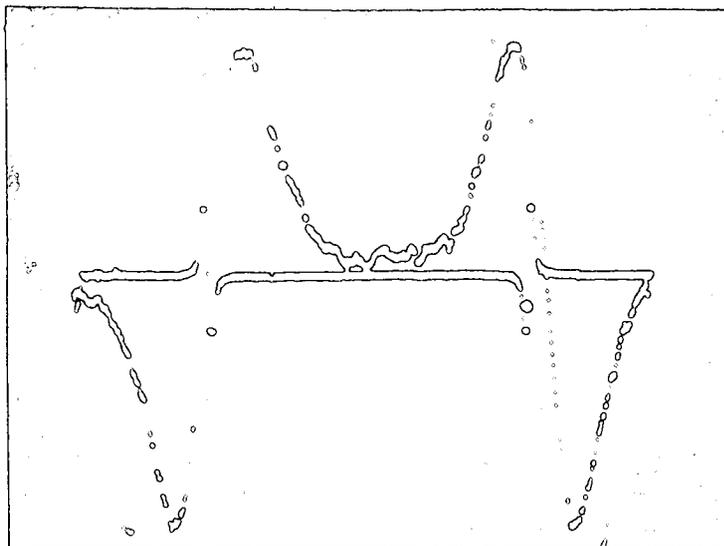
Munis de cette estimation sur la largeur des raies de résonance, nous avons entrepris la recherche des croisements de niveaux : les techniques sont celles décrites dans la partie III (modulation du champ, ou de la polarisation et détection synchrone); le champ a été balayé très lentement autour des valeurs présumées de croisement de niveaux (les constantes de temps typiquement utilisées pour ce genre de recherche étant de l'ordre de 30 à 100 s).

1° doublet $d'_4 d_4$

Nous avons trouvé pour ce doublet 3 croisements de niveaux : les premiers assez intenses, le dernier d'intensité beaucoup plus faible. La position de ces croisements de niveaux est respectivement de :

| |
|-----------------|
| 8202.8 G ± .5 G |
| 9536.5 G ± .5 G |
| 11190 G ± 1 G |

[☆]) Cette dernière observation fait l'objet d'un commentaire approfondi dans le paragraphe B-b.

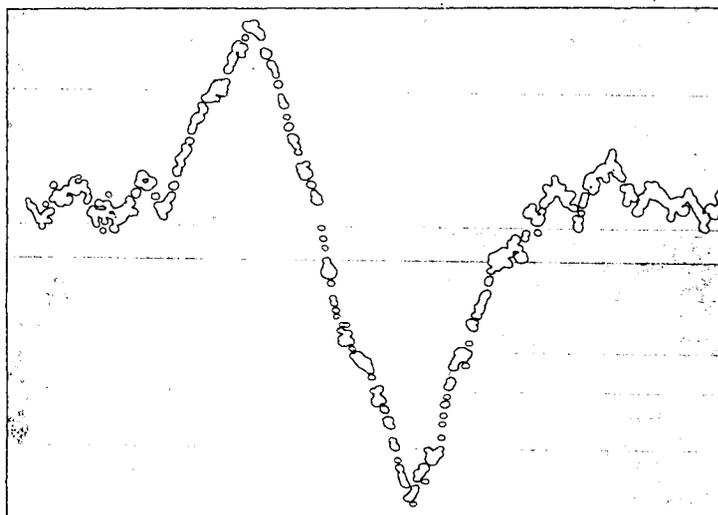


Signal à 8202,8 G

$\Gamma \sim 1,2\text{G}$

27 passages

$\tau = 10\text{ s}$

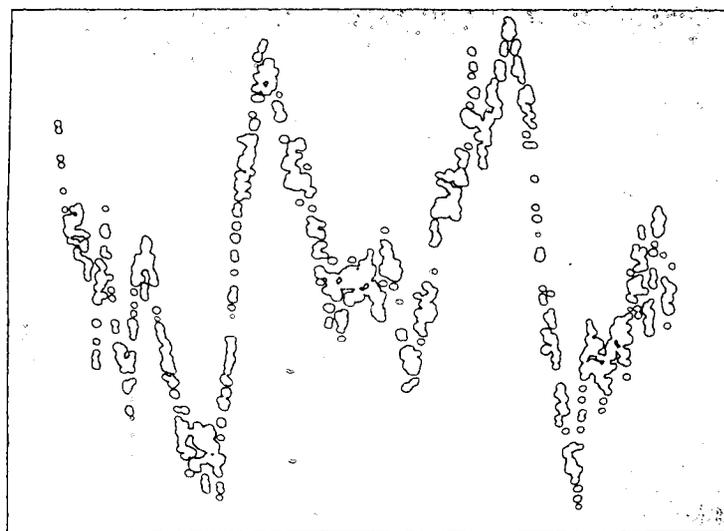


Signal à 9536,5 G

$\Gamma \sim 1,7\text{G}$

6 passages

$\tau = 3\text{ s}$



Signal à 11190 G

6 passages

$\tau = 30\text{ s}$

Fig. XXV Croisements $4d_4 \cdot 4d'_4$

(Compte tenu de la difficulté d'interprétation de ces signaux, nous n'avons pas recherché la précision sur la mesure du champ magnétique de croisement).

Nous avons pu vérifier que ces résonances de fluorescence présentaient bien le diagramme angulaire prévu par la théorie : absorption à 90° de la direction d'excitation, dispersion à 45° (cf. formule (IV-1), page 85) ce qui élimine l'hypothèse de résonances d'anticroisements. Mise à part la première résonance de la séquence qui peut être immédiatement et très vraisemblablement assimilée à la résonance de croisement des sous-niveaux ($d_4 M_J=4$; $d_4 M_J=2$), les deux autres résonances restent dans un premier temps très difficiles à expliquer.

2) doublet $d'_1 d''_1$

Le même problème d'assignement se pose pour les résultats obtenus sur le doublet $d'_1 d''_1$ où de 7500 G à 11000 G, nous n'avons observé que deux croisements seulement respectivement à :

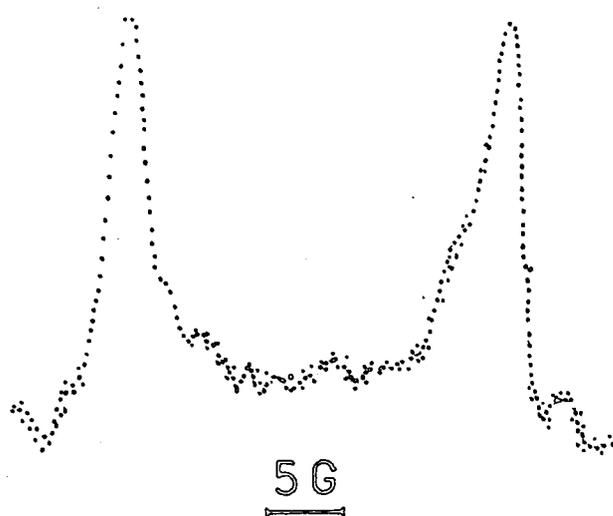
| | |
|----|---------------------|
| et | 7950.3 G \pm .5 G |
| | 9590.5 G \pm .5 G |

Nous avons observé ces signaux de résonance sur les deux raies de fluorescence à 5748 \AA ($4d'_1 d''_1 \rightarrow 2p_9$) et 5974 \AA ($4d'_1 d''_1 \rightarrow 2p_6$).

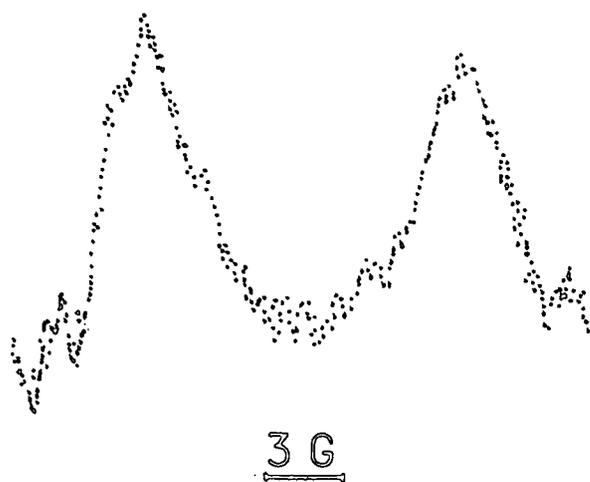
Les signaux de résonance sont environ trois fois plus intenses sur la raie à 5748 \AA , mais nous les avons observés sur les deux raies citées avec des formes identiques.

Comme on peut le constater sur la figure XXVI, la forme des signaux n'est pas une forme d'absorption pure en observation à 90° de la direction d'excitation (il en est de même pour la forme de dispersion en observation à 45° du jet incident). Deux hypothèses peuvent a priori expliquer cette allure de courbe : la courbure des sous-niveaux qui se croisent, ou le mélange avec un signal d'anticroisement.

L'importance de la dissymétrie semble difficilement explicable par la courbure des niveaux. Nous en avons conclu qu'au signal de résonance de cohérence (croisement de niveaux) se superpose un signal d'anticroisement de niveaux. En effet, la présence à 4 cm^{-1} seulement d'états 4f pourrait expliquer ce phénomène lié à l'existence d'un effet Stark motionnel. Après collision, les atomes de néon excités possèdent une vitesse de recul \vec{v}_r , dans le champ magnétique \vec{B} , ils subissent donc l'effet d'un champ électrique motionnel $\vec{E} = \vec{v}_r \wedge \vec{B}$.



Signal à 7950,3 G
 $\Gamma \sim 1,3$ G
 (~ 4 heures d'enregistrement)
 $P \approx 6 \cdot 10^{-2}$ Torr



Signal à 9590,5 G
 (~ 4 heures d'enregistrement)
 $P \approx 7 \cdot 10^{-2}$ Torr

Fig ~~XXVI~~ Croisements $4d'_1 - 4d''_1$

Ce champ électrique, perpendiculaire au champ magnétique \vec{B} (dirigé selon Oz, axe de quantification) couple des niveaux de parités différentes, et tels que $\Delta m = \pm 1$.

Au deuxième ordre de perturbation, ce champ électrique est donc susceptible, par l'intermédiaire des niveaux 4f, de lever la dégénérescence des sous-niveaux qui se croisent ($\Delta m = 2$) (La théorie complète de cet effet, et les formes de courbes expérimentales obtenues dans de telles situations ont été étudiées en détail dans WIEDER et ECK (¹⁰³) et GLASS-MAUJEAN et al. (¹⁰⁴)).

Cette hypothèse s'est trouvée parfaitement vérifiée par l'observation de la résonance à 7950 G (ainsi que celle à 9590 G) sur la transition $4d_1 \rightarrow 2p_7(J=1)$. Les règles de sélection des transitions dipolaires électriques interdisent en effet l'observation de la résonance de cohérence entre les sous-niveaux ($M'' = -1, M' = -3$) sur une telle raie où il n'existe pas de transitions possibles entre le sous-niveau $m = -3$ du niveau d_1 et le niveau fondamental).

La question qui se pose alors naturellement est la suivante : cet effet Stark motionnel peut-il être responsable du déplacement important des résonances que nous avons observées. La réponse est négative pour la raison suivante :

La symétrie de la collision excitatrice est celle du jet (les temps de couplage avec le champ magnétique qui lui est perpendiculaire sont en effet beaucoup plus longs que la durée moyenne d'une collision qui est de 10^{-15} à 10^{-16} s). Il en résulte que les vitesses de recul \vec{v}_r des particules de la cible doivent être réparties avec la même symétrie axiale. Le champ électrique motionnel ($\vec{v}_r \wedge \vec{B}$) varie donc de 0 à une valeur maximale $E_m = v_r B$. A chaque valeur de ce champ correspond un déplacement donné de la résonance : dans l'hypothèse où le déplacement par effet Stark serait très grand devant la largeur des raies (~ 1 G), il serait alors impossible d'observer une résonance dans notre configuration géométrique expérimentale.

Nous pouvons donc en conclure que très vraisemblablement il existe un effet Stark motionnel qui produit un anticroisement du second ordre des niveaux que nous étudions, mais que cette perturbation ne peut en aucun cas expliquer un important déplacement des résonances observées (celui-ci peut être au plus de l'ordre de grandeur de la largeur de la résonance, soit 1 G).

c) Conclusion

Avant de conclure, nous noterons enfin que nous avons étudié en détail les raies de fluorescence sélectionnées par nos filtres interférentiels, par comparaison avec diverses tables de longueurs d'onde pour éliminer une

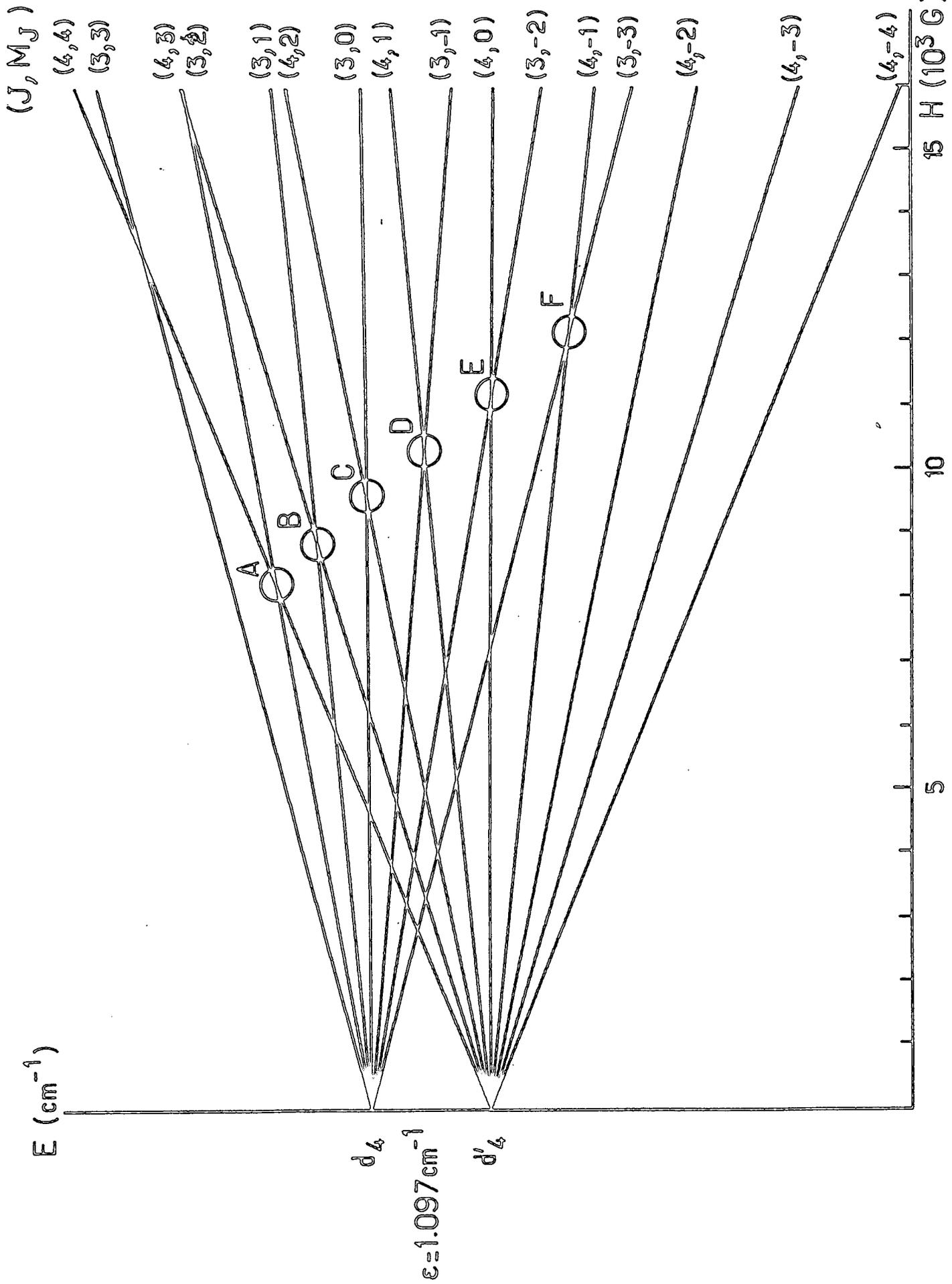


Fig XXXVII Diagramme Zeeman des niveaux $4d_4 \ 4d'_4$

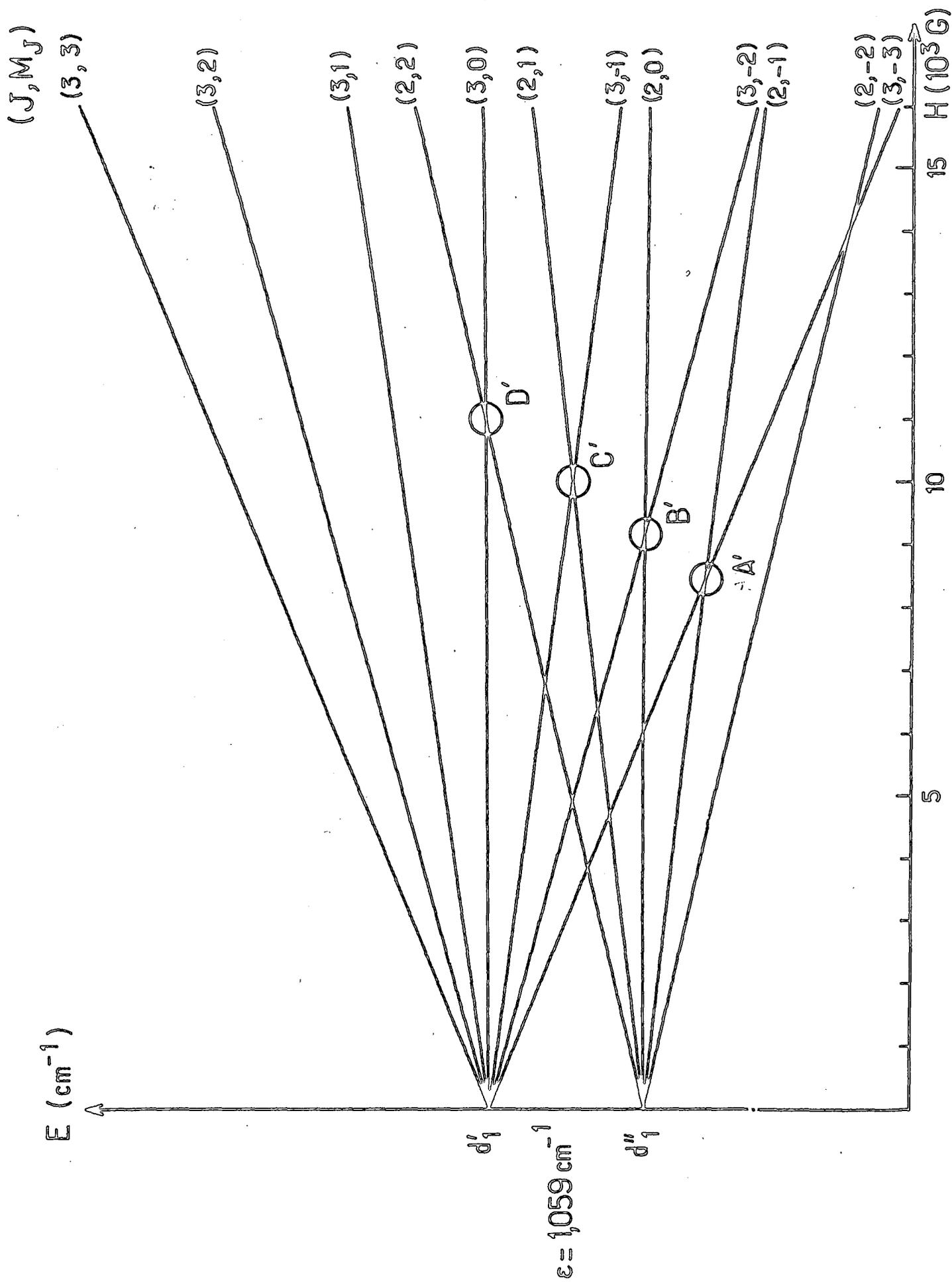


Fig - XXXVIIII Diagramme Zeeman des niveaux $4d'$ $4d''$

éventuelle erreur grossière sur la détermination des niveaux observés (en effet, le spectre du néon est très dense et nos filtres interférentiels ne résolvent pas entièrement les transitions étudiées des raies voisines). Cette étude s'est révélée négative : il semble bien que les résonances mesurées proviennent effectivement des doublets auxquels nous les avons assignés. Par ailleurs, nous avons tracé sur la fig. XXVII l'allure probable du spectre de l'effet Zeeman des niveaux $d'_4 d_4$, l'examen de ce diagramme montre à l'évidence que les seuls signaux observables dans le domaine de champ magnétique envisagé (7000 - 11000 G) sont des signaux de croisements ou d'anticroisements de niveaux $\Delta m = 2$ (il en est de même pour le doublet $d'_1 d''_1$, figure XXVIII).

Avant d'aborder l'analyse théorique de nos résultats expérimentaux nous pouvons étudier un dernier élément d'information contenu dans ceux-ci : il concerne l'intensité relative des différents croisements.

Nous ne reprendrons pas en détail l'analyse de la forme des signaux de croisements de niveaux observés qui a été faite dans de nombreuses références (voir en particulier DESCOUBES (58), ou WIEDER et ECK (103)), mais nous nous attacherons simplement à l'intensité relative des différents croisements des sous-niveaux Zeeman d'un même multiplet : il apparaît que toute la dépendance en M de ce signal est contenue dans deux types de facteurs : la valeur moyenne de l'opérateur d'excitation, et celle de l'opérateur de détection. Pour ce qui est de ce dernier dans une transition dipolaire électrique (transition $\Delta l = 1$), il se décompose en divers opérateurs tensoriels d'ordre inférieur ou au plus égal à 2; le signal de croisement de niveaux $\Delta m = 2$ est donc proportionnel au facteur

$$(-1)^{J'-M'J} \begin{pmatrix} J' & J & 2 \\ -M' & M_J & -2 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-13})$$

qui contient toute la dépendance en M (théorème de Wigner-Eckart).

Pour ce qui est de l'opérateur d'excitation, nous ne connaissons pas exactement son ordre tensoriel mais l'analyse des propriétés de symétrie de la collision par jet prouve qu'il se décompose nécessairement uniquement en fonction d'opérateurs d'ordre tensoriel pair T^{2k} . La valeur moyenne de l'opérateur d'excitation fait donc intervenir des coefficients (3j) :

$$(-1)^{J'-M'J} \begin{pmatrix} J' & J & 2k \\ -M' & M_J & -2 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-14})$$

qui contiennent toute la dépendance en M de cette valeur moyenne.

TABLEAU VI-6

Facteurs gouvernant l'intensité relative des différents croisements

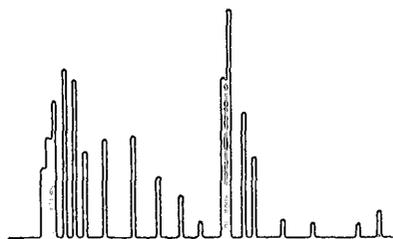
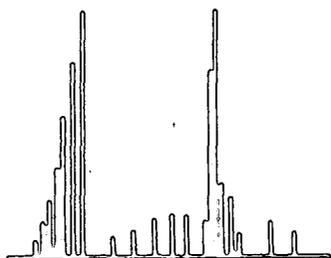
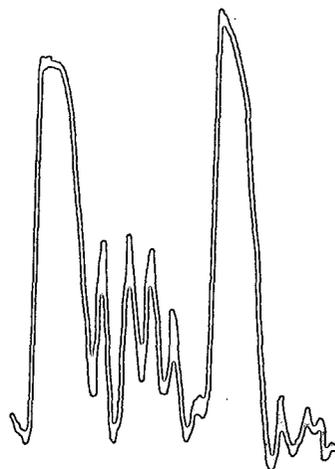
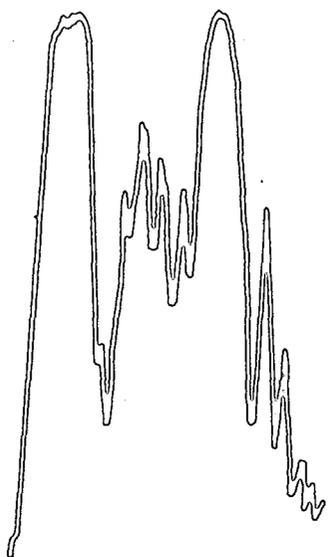
| | | opérateur tensoriel d'ordre 2 détection ou excitation | opérateur tensoriel d'ordre 4 excitation | Intensité relative des différents croisements mesurés |
|-------------------------|------------|---|--|---|
| doublet $d_4 d'_4$ | (4,2) A | .211 | .174 | 8202 G I=1 |
| | (3,1) B | .236 | .078 | 9536 G I=0.8 |
| | (2,0) C | .218 | .156 | 11190 G I=0.4 |
| | (1,-1) D | .252 | .058 | |
| | (0,-2) E | .126 | .104 | |
| | (-1,-3) F | .069 | .284 | |
| doublet $d'_1 d''_1$ | (-3,-1) A' | .267 | .146 | 7950 G I ≈ 1 |
| | (-2,0) B' | .267 | .195 | 9590 G I ≈ 0.8 |
| | (-1,1) C' | .069 | .063 | |
| | (0,2) D' | .119 | .218 | |

L'intensité relative de chaque signal mesuré est donc proportionnelle (à l'effet Paschen-Back près) au produit du coefficient (VI-13) par une combinaison linéaire des coefficients (VI-14).

Nous avons reporté dans le tableau VI-6 la valeur de ces coefficients $3j$ pour les premières valeurs de k . Nous pouvons constater que l'intensité relative des croisements est susceptible de varier d'un facteur 2 au moins selon l'hypothèse faite sur la nature de l'excitation. Sachant que les signaux que nous avons observés présentaient, dans les conditions où nous les avons trouvés, un rapport signal sur bruit de l'ordre de 2 à 4 pour les croisements les plus intenses (les premiers de chaque séquence), nous n'éliminerons pas l'hypothèse qu'il existe dans la gamme 7000 - 11000 G des croisements supplémentaires que nous n'avons pas observés.

Toutefois, quelle que soit l'assignation de chaque signal de résonance, il apparaît d'une manière certaine que les signaux observés remettent profondément en cause le diagramme Zeeman des multiplets observés et par suite jettent un doute sur la valeur des fonctions d'onde et des facteurs de Landé utilisés. La valeur des écarts d'énergie en champ nul donnés par C. MOORE a été obtenue à partir de mesures très précises de longueur d'onde, vraisemblablement l'erreur faite sur ces déterminations est au plus de quelques millièmes de cm^{-1} (c'est d'ailleurs l'ordre de grandeur de l'incertitude obtenue sur les multiplets $s^1s^1s^1s^1$ récemment remesurés par G. GRYNBERG et al. (105) par technique de spectroscopie à deux photons).

Les facteurs de Landé ont été déterminés par GREEN et PEOPLES (89) par étude à 32000 G de l'effet Paschen-Back des multiplets considérés. Nous reproduisons sur la figure XXIX les spectres de GREEN et PEOPLES. Peu familiers de ce genre de technique, il nous est difficile d'apprécier la précision réelle obtenue dans l'analyse de ces spectres; il nous semble toutefois que la précision des résultats compilés dans la table de C. MOORE est vraisemblablement très surestimée.



-a-

-b-

a Multiplet $4 d'_1 d''_1 \rightarrow 2p_9$ 5748 Å (H = 32 000 G)

b Multiplet $4 d'_4 d_4 \rightarrow 2p_9$ 5764 Å (H = 32000 G)

Fig. XXIX Spectres Zeeman du Néon d'après Green (89)

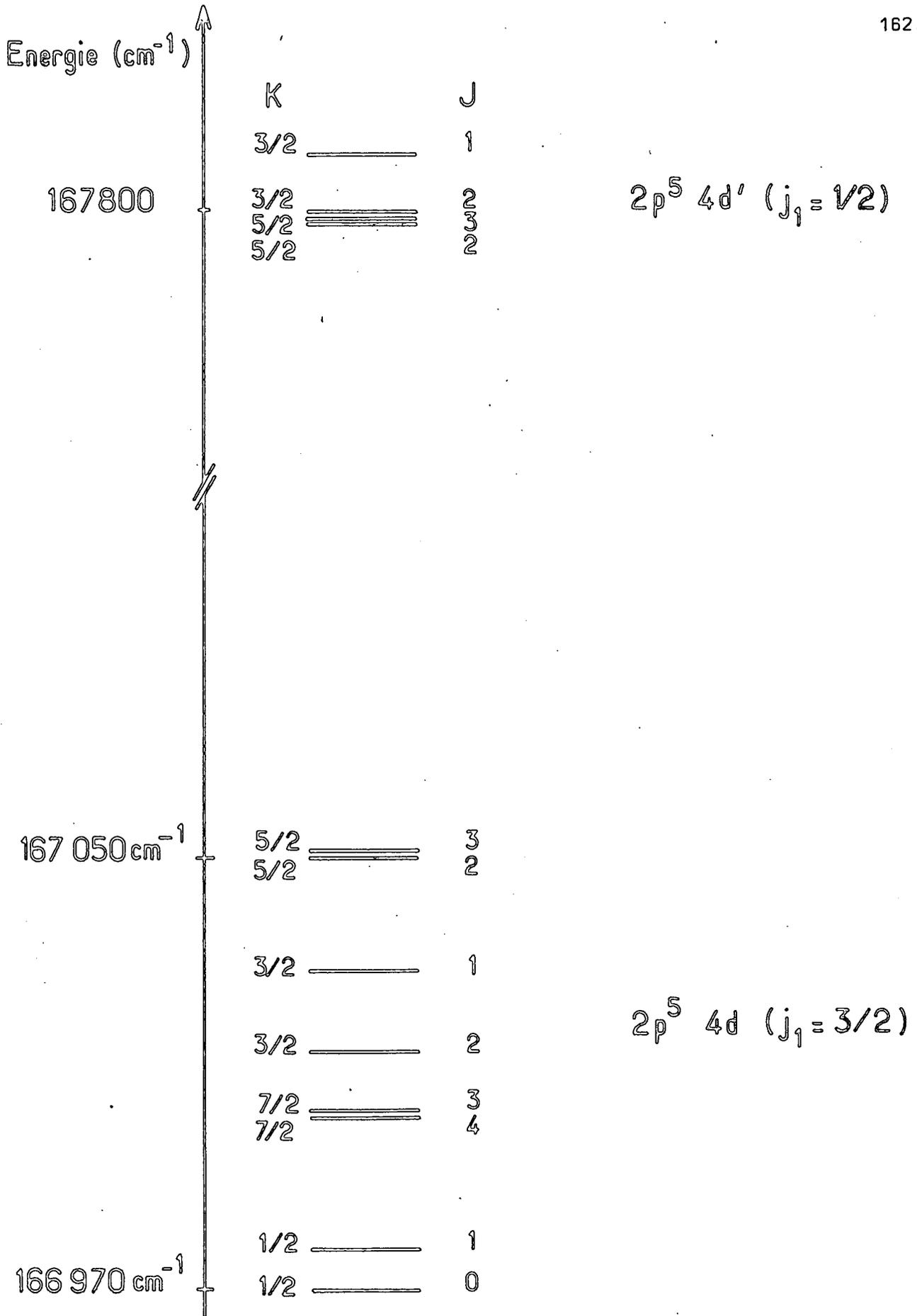


Fig XXXIII Configuration $2p^5 4d$ - du Néon

C. Analyse phénoménologique des résultats expérimentaux

Compte tenu de l'incertitude sur la position exacte de l'ensemble des croisements de niveaux d'un même multiplet, l'analyse qui suit ne peut être considérée comme définitive. En particulier, l'examen de la position des résonances observées et sa comparaison aux résultats prévisionnels du tableau VI-4 rend très difficile l'assignement de chaque résonance au croisement d'un couple particulier de sous-niveaux de m_j donnés. C'est pourquoi, nous avons étudié la totalité des assignements possibles pour chaque séquence de croisements. Nous présentons en détail ci-dessous les deux assignements qui sont de très loin les plus probables compte tenu de la régularité de la séquence : les seuls éléments que nous possédons alors pour trancher en faveur d'une de ces deux options sont la comparaison de l'énergie de structure fine et des facteurs de Landé aux résultats expérimentaux antérieurs, éventuellement l'intensité relative des différents signaux observés et la cohérence interne du modèle utilisé. Il est évident que la confirmation de cette hypothèse passe par l'observation d'autres signaux de résonance (ou la mesure de facteurs de Landé en champ faible) compatibles avec le schéma que nous allons tracer maintenant. Des expériences sont prévues à cet effet.

Dans ce paragraphe, nous analysons la séquence de croisements mesurés de manière semi-phénoménologique dans le cadre d'une approximation à deux niveaux; devant les difficultés d'un tel modèle, nous proposons ensuite une étude dans un système à 4 niveaux. Nous traiterons dans le paragraphe D seulement de l'origine physique possible de tels effets (mélange de fonctions d'onde, altération des facteurs de Landé).

a) Approximation à deux niveaux

Ayant constaté que les doublets que nous avons étudiés sont assez nettement isolés des autres niveaux de la configuration et dans l'hypothèse où le couplage (jK) est très proche du couplage réel, le problème se ramène en première approximation à l'étude d'un système à deux niveaux dans un sous-espace de nombres quantiques j_1 et K déterminés [$(3/2, 7/2)$ pour le doublet $d'_4 d_4$; $(3/2, 5/2)$ pour le doublet $d'_1 d_1$].

L'effet Paschen-Back est, dans cette hypothèse, très simple à décrire. La matrice d'un tel effet est donnée ci-dessous pour les deux multiplets étudiés.

- Effet Paschen-Back du doublet d'_4-d_4

$$\left(\begin{array}{cc} mg_4 \mu_B H & \mu_B H (g_3 - g_4) \sqrt{\frac{16 - m^2}{4}} \\ \mu_B H (g_3 - g_4) \sqrt{\frac{16 - m^2}{4}} & mg_3 \mu_B H + \epsilon_{34} \end{array} \right)$$

où g_4 représente le facteur de Landé du niveau $J = 4$ (d'_4)

g_3 celui du niveau $J = 3$ (d_4)

ϵ_{34} l'écart d'énergie en champ nul des deux niveaux

- Effet Paschen-Back du doublet $d'_1-d''_1$

$$\left(\begin{array}{cc} mg'_2 \mu_B H & \mu_B H (g'_2 - g'_3) \sqrt{\frac{9 - m^2}{4}} \\ \mu_B H (g'_2 - g'_3) \sqrt{\frac{9 - m^2}{4}} & mg'_3 \mu_B H + \epsilon_{23} \end{array} \right)$$

où g'_2 représente le facteur de Landé du niveau $J = 2$ (d''_1)

g'_3 celui du niveau $J = 3$ (d'_1)

ϵ_{23} l'écart d'énergie en champ nul des deux niveaux.

Le calcul des croisements de niveaux se ramène alors à la résolution d'équations du second degré couplées, tâche fastidieuse, mais sans difficultés, dont nous ne rapporterons ici que le résultat. Il importe de remarquer que ces études de croisements de niveaux dans un système à deux niveaux ne permettent de déterminer que deux paramètres seulement : les rapports $\frac{\epsilon}{g_1}$ et $\frac{g_2}{g_1}$.

Pour le doublet $d_4 d'_4$ la régularité de la séquence de croisements observés rend plausibles deux hypothèses et deux seulement, qui sont reportées dans le tableau VI-7 : nous y avons reporté pour chacune des assignations des 3 croisements de niveaux observés, d'une part les facteurs de Landé qui optimisent l'accord entre le calcul et l'expérience (option α), la séparation du doublet en champ nul étant alors fixée à la valeur expérimentale rapportée par C. MOORE; d'autre part (option β) fixant le facteur de Landé du niveau de $J=4$ à la valeur obtenue en couplage pur, nous avons déterminé alors le facteur de Landé de l'autre niveau et l'écart d'énergie en champ nul (la justification de

TABLEAU VI-7

| |
|---|
| Doublet $d'_4 d_4$ [(7/2 4); (7/2 3)] |
|---|

| Position des croisements valeurs expérimentales en Gauss | M_J, M'_J | 1ère assignation valeurs calculées en Gauss | 2ème assignation M_J, M'_J |
|--|-------------|---|---------------------------------|
| 8202.8 | (4, 2) A | 8202.8 | (4,2) A 8202.8 |
| 9536.5 | (3, 1) B | 9543.6 | (2,0) C 9565.3 |
| 11190 | (2, 0) C | 11186.3 | (0,-2) E 11170.0 |
| Ecart quadratique moyen | | 5 | 18 |

Facteurs de Landé et (ou) structure fine.

| | Racah pur | 1ère assignation (ABC) | | 2ème assignation (ACE) | |
|-----------------|-----------|------------------------|--------------------|------------------------|--------------------|
| | | α | β | α | β |
| g(J=4) | 1.250 | 1.197 | 1.250 [*] | 1.275 | 1.250 [*] |
| g(J=3) | 1.036 | .910 | .951 | 1.098 | 1.079 |
| ϵ_{34} | | 1.097 [*] | 1.146 | 1.097 [*] | 1.077 |

| |
|----------------------|
| Doublet $d'_1 d_1''$ |
|----------------------|

| | | |
|----------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| valeurs expérimentales | 7950 G | 9590 G |
| 1ère assignation des croisements | A' ($M_J=-3, M'_J=-1$) | B' ($M_J=-2, M'_J=0$) |
| 2ème assignation des croisements | B' ($M_J=-2, M'_J=0$) | C' ($M_J=-1, M'_J=+1$) |

Facteurs de Landé.

| | Racah pur | 1ère assignation A'B' | 2ème assignation B'C' |
|-----------------|-----------|-----------------------|-----------------------|
| g(J=3) | 1.270 | 1.294 | 1.259 |
| g(J=2) | .698 | .924 | 1.064 |
| ϵ_{23} | | 1.059 [*] | 1.059 [*] |

^{*} les valeurs marquées d'une astérisque sont les valeurs fixées dans l'ajustement.

cette deuxième hypothèse réside dans le fait que le niveau d_4 est le seul niveau de $J = 4$ de l'ensemble des configurations $2p^54d + 2p^55s$, il est par suite vraisemblablement très proche du couplage jK pur) .

L'examen des résultats reportés dans le tableau VI-7 prouve que le système présente un écart par rapport à un système à deux niveaux. Il faut surtout remarquer que les déviations au couplage de Racah mises en évidence par les facteurs de Landé sont très importantes (ce qui est de nature à jeter un doute sur le modèle à deux niveaux proposé. En effet, de tels valeurs des facteurs de Landé supposeraient implicitement que l'on attribue un g_s "effectif" à l'électron d de 2.3 dans l'option α , 2.16 dans l'option β). Compte tenu de sa moindre déviation par rapport au couplage jK pur, nous pensons donc que la deuxième séquence est la plus plausible.

Pour le doublet d'_1, d''_1 , dans la mesure où nous n'avons observé que deux croisements seulement, il est impossible de mettre en évidence un écart par rapport au modèle à deux niveaux; en tout état de cause le système n'est certainement pas bien décrit en couplage (jK) pur, comme on peut le constater par examen des facteurs de Landé. Pour ce doublet, la première séquence paraît la plus plausible.

Revenant alors sur les estimations d'intensité relative des différents croisements (voir tableau VI-6, p.159, paragraphe précédent (B-c)) nous voyons que l'assignation la plus probable de ces croisements renforce l'idée que la symétrie de l'excitation est essentiellement d'ordre 4; ceci serait compatible avec le fait qu'un premier examen ne nous a pas permis de trouver les croisements B et D et avec le fort taux de polarisation observé sur les niveaux D de l'hélium, mais reste totalement qualitatif.

En conclusion, cette étude dans un modèle à deux niveaux nous a permis de dégager une assignation probable des croisements de niveaux et de déterminer dans ce cadre les facteurs de Landé des 4 niveaux mis en cause. Par ailleurs, cette étude nous a prouvé que le couplage réel des niveaux est vraisemblablement assez loin du couplage de Racah pur. Pour expliquer cette déviation au couplage de Racah, nous avons envisagé deux hypothèses :

- . Ou bien à l'intérieur même de la configuration $2p^54d$ le nombre quantique K n'est pas un bon nombre quantique et les niveaux de même J et de K différents sont mélangés par diverses interactions (électrostatique d'échange, interactions magnétiques)
- . Ou bien la déviation au couplage de Racah est due à l'interaction de configurations. Nous avons déjà vu que le mélange avec la configuration 5s ne suffit pas

à expliquer cette déviation (cf. paragraphe A, optimisation de LIBERMAN, où la configuration $2p^55s$ est prise en compte). Nous avons ensuite calculé les facteurs de Landé des niveaux de la configuration $2p^55g$ susceptibles de perturber les niveaux étudiés : ceux-ci sont tous très voisins de 1; il faudrait donc une interaction extrêmement forte avec la configuration $2p^54d$ pour expliquer les écarts au couplage de Racah que nous avons mis en évidence.

Dans cette hypothèse, il serait nécessaire d'étendre la base de travail à un très grand ensemble de configurations paires quasi dégénérées. Si par ailleurs c'est l'interaction de configurations lointaines (continuum y compris) qui est responsable d'un tel effet, il devient alors nécessaire de traiter ces effets au premier ordre et une méthode de champ central n'est peut-être pas la méthode la mieux adaptée à la résolution d'un tel problème.

Devant l'ampleur du problème, nous n'avons examiné en détail que la première des deux hypothèses. Nous l'avons envisagée sous deux angles : tout d'abord un angle semi phénoménologique dans le cadre d'un système à 4 niveaux (paragraphe C-b); puis dans le paragraphe D, nous avons essayé de reprendre le problème a priori sur une base beaucoup plus large en explicitant les diverses interactions magnétiques qui peuvent coupler les niveaux étudiés. . . .

b) Approximation à 4 niveaux

L'approximation à 4 niveaux est fondée sur les observations suivantes : dans l'ensemble des configurations $2p^54d$ et $2p^55s$, le niveau d'_4 est le seul niveau de $J = 4$, il ne peut être perturbé que par interaction avec des configurations $2p^5nd$ ou $2p^5ng$ lointaines et dans cette première approche, nous supposons que c'est un niveau pur $|3/2, 7/2; 4 \rangle$. Le niveau $J = 3$ du doublet d'_4d_4 peut a priori être couplé aux deux autres niveaux de $J = 3$ de la configuration; dans un premier temps, nous ne prendrons en compte que le niveau d''_1 , l'autre niveau de $J = 3$ ($|1/2, 5/2; 3 \rangle$) étant distant de presque 800 cm^{-1} .

Le couplage par le champ magnétique impose alors de prendre en compte également le niveau d'_1 ($J = 2$).

Dans ce modèle, nous désirons mesurer la force de "l'interaction effective" nécessaire pour rendre compte des croisements de niveaux que le modèle à 2 niveaux est inapte à décrire correctement. Dans ce but, nous ajusterons les valeurs calculées aux valeurs expérimentales en faisant varier non pas les facteurs de Landé mais le couplage des fonctions d'onde en champ nul. (Toutefois dans la mesure où nous avons tronqué sévèrement la base des niveaux de $J = 2$, nous laisserons également ajustable le facteur de Landé de ce niveau).

Sur une telle base, la matrice du hamiltonien Zeeman s'écrit $\star)$:

$$\begin{array}{cccc}
 d'_4 & d_4 & d''_1 & d''_1 \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 mg_4 \mu_B H & \mu_B H (g_3 - g_4) \sqrt{\frac{16-m^2}{4}} & \frac{\mu_B H}{7} \sqrt{\frac{16-m^2}{6}} & 0 \\
 & mg_3 \mu_B H + \epsilon_{34} & -\frac{m \mu_B H}{21 \sqrt{6}} + W & 2 \mu_B H \frac{\sqrt{6(9-m^2)}}{63} \\
 & & mg_3' \mu_B H + \epsilon_{23} + E & \mu_B H (g_2' - g_3') \sqrt{\frac{9-m^2}{4}} \\
 & & & mg_2' \mu_B H + E
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

Les éléments qui n'ont pas été définis dans le paragraphe précédent sont, outre les termes non diagonaux de l'effet Zeeman :

E : paramètre qui mesure la position en champ nul du doublet $d'_1 d''_1$ par rapport à $d'_4 d_4$

et W : paramètre de couplage entre les niveaux de $J = 3$

Il est possible dans une telle description de prédire simultanément la position des 5 croisements observés. Nous avons essayé de les ajuster aux valeurs expérimentales en laissant libres les 4 paramètres ϵ_{34} , ϵ_{23} , W et g'^2 (facteur de Landé du $J = 2$). Ce problème admet effectivement une solution $\star\star)$ mais suppose un couplage extrêmement important entre les deux niveaux de $J = 3$ ($W = -24.6 \text{ cm}^{-1}$) ce qui supposerait que les fonctions d'onde en champ nul des niveaux de $J = 3$ sont très mélangées (79%, 21%).

Dans cette hypothèse, on réussit à rendre compte à 0,2 G près de l'ensemble des 5 croisements; les valeurs des facteurs de Landé en champ faible seraient respectivement de :

$\star)$ Nous avons négligé de réécrire la partie symétrique de cette matrice pour alléger les notations.

$\star\star)$ Les résultats présentés ici concernent l'assimilation la plus probable telle qu'elle a été déterminée au paragraphe a ($A, B, C; A', B'$). Nous avons également cherché pour ce modèle d'autres assignations possibles des croisements mais il s'est avéré que la plus probable est d'une façon très nette celle déterminée en a.

| | | |
|---|------------------------|----------------------------------|
| { | $g(d'_4, J=4) = 1.25$ | (1.25 C. MOORE d'après GREEN) |
| | $g(d_4, J=3) = 1.07$ | (1.05 ") |
| | $g(d''_1, J=3) = 1.23$ | (1.25 ") |
| | $g(d'_1, J=2) = .86$ | (.99 ") |

les valeurs des écarts en champ nul de :

| | |
|---|------------------|
| $4d'_4 - 4d_4 = 1.09 \text{ cm}^{-1}$ | (1.097 C. MOORE) |
| $4d'_1 - 4d''_1 = 1.02 \text{ cm}^{-1}$ | (1.057 C. MOORE) |

Toutes ces valeurs se fixent dans le programme de minimisation à mieux de 1%.

Les déterminations des paramètres du doublet $d'_1 d''_1$ sont certainement assez imprécises dans la mesure où nous avons peu d'informations (2 croisements seulement) sur cette structure (il y a ainsi peu de contraintes sur les paramètres g'_2 et ϵ_{23}). Les grandeurs relatives au doublet $d'_4 d_4$ semblent au contraire assez satisfaisantes. Quelle signification physique doit-on attribuer à ce couplage ? Nous essayons d'y répondre dans le paragraphe suivant.

D. Etude a priori de l'effet Zeeman de la configuration $2p^5 4d$

L'étude phénoménologique du paragraphe précédent nous laisse extrêmement insatisfaits dans la mesure où elle ne nous apporte aucune compréhension physique des interactions qui sont susceptibles de rendre compte du diagramme Zeeman observé. Nous avons donc repris une description paramétrique de la configuration $2p^5 4d$ en cherchant à améliorer la description de LIBERMAN décrite dans le paragraphe A ^{☆)} (tableaux VI-2 et VI-3). Les moyens dont nous disposons pour opérer une telle amélioration sont de deux ordres.

☆) Nous avons été amenés à utiliser une base de 12 niveaux ($J=4, J=3, J=2, J=1$) pour tenir en compte tous les niveaux directement couplés à ceux qui nous intéressent, soit par l'effet Zeeman, soit par les interactions magnétiques. Les effets "effectifs" parasites liés à l'utilisation d'une base tronquée ne peuvent de ce fait provenir que de l'interaction de configuration.

α) prendre en compte des interactions négligées dans l'approximation du paragraphe A; on pense immédiatement à l'interaction spin-orbite de l'électron externe, éventuellement aux interactions magnétiques mutuelles (spin-spin, spin-autre orbite), ou encore à l'interaction diamagnétique avec le champ extérieur ...

β) utiliser un critère d'optimisation plus sensible que celui du paragraphe A (qui consiste en une optimisation sur le spectre d'énergie en champ nul de la configuration). Il est évident que le choix qui s'impose consiste à faire une optimisation sur la position des croisements de niveaux eux-mêmes. C'est un critère extrêmement sévère car il est sensible simultanément à la description de l'énergie en champ nul (structures fines) et à la qualité des fonctions d'onde (facteurs de Landé). Dans la mesure où nous n'avons d'information de ce type que sur deux doublets seulement de la configuration, il est par contre évident que ce critère sera peu ou pas sensible aux interactions qui ne lèvent pas la dégénérescence de ces doublets (ce qui est le cas de l'interaction spin-orbite du coeur par exemple). Dans cette nouvelle optimisation, nous ne ferons donc varier que les paramètres qui contribuent fortement à la structure fine des doublets et nous fixerons les autres à la valeur déterminée dans le paragraphe A.

Nous présentons dans ce paragraphe successivement et de manière très succincte les différentes interactions que nous avons étudiées pour essayer de rendre compte de la structure observée, puis les résultats des meilleurs ajustements réalisés. L'ensemble des matrices de dépendance angulaire sont reportées dans les appendices IV, V, et VI.

Interaction spin-orbite de l'électron externe (ζ_D)

Nous donnons, dans le tableau VI-8, le résultat du calcul de la position des croisements de niveaux sans et avec prise en compte de l'interaction spin-orbite externe (approximations I et II). Entre les deux déterminations, seuls les paramètres G_3 et ζ_D ont varié; tous les autres paramètres sont fixés aux valeurs déterminées en A.

Comme il était prévisible, l'introduction de l'interaction spin-orbite de l'électron externe apporte une amélioration spectaculaire à la détermination de la structure fine des doublets; toutefois, il est manifeste que cet ajustement ne donne pas encore des fonctions d'onde totalement satisfaisantes. Nous en avons d'ailleurs deux preuves indépendantes :

- . d'une part nos séquences de croisements de niveaux ne sont pas encore bien ajustées aux séquences expérimentales
- . nous possédons, d'autre part, une information sur le mélange des fonctions d'onde des niveaux s''''_1 , s'_1 qui nous est donnée par les résultats de GRYNBERG et al. (105) sur la structure hyperfine de ces niveaux : il apparaît que ce mélange est encore

TABLEAU VI-8

Résultats expérimentaux

Approximation I

Approximation II
Les valeurs notées d'une astérisque sont celles sur lesquelles a porté l'ajustement aux valeurs expérimentales
option α option β option γ
assign^t ABC,A'B' ACE,A'B' ACE,B'C'

| Paramètres ajustés : | | | | | |
|---|-------------------------|----------|---------|---------|---------|
| G_3 | | .099 | .116 | .1096 | .1015 |
| ζ_d | | 0 (fixé) | .345 | .3567 | .2979 |
| Séquence des croisements d'_4-d_4 (en gauss) | 8202.8 | 10781 | 8728 ☆ | 7739 ☆ | 7739 ☆ |
| | | 13100 | 9633 ☆ | 8544 | 8544 |
| | 9536.5 | 15942 | 10651 ☆ | 9446 ☆ | 9446 ☆ |
| | | 18898 | 11788 | 10456 | 10456 |
| | 11190 | 21102 | 13041 | 11568 ☆ | 11568 ☆ |
| | | 23500 | 14406 | 12779 | 12780 |
| Séquence des croisements $d'_1-d''_1$ (en gauss) | 7950.3 | 2071 | 8163 ☆ | 8164 ☆ | 7071 |
| | | 2395 | 9398 ☆ | 9399 ☆ | 8146 ☆ |
| | 9590.5 | 2771 | 10865 | 10867 | 9414 ☆ |
| | | 3200 | 12582 | 12585 | 10900 |
| $\sqrt{\frac{\sum(H_{cal}-H_{ex})^2}{N}}$ | | 5057 | 363 | 299 | 295 |
| <u>Structures fines (en cm^{-1})</u> | | | | | |
| $\epsilon(d'_4 d_4)$ | 1.097 (⁹⁸) | 1.30 | 1.169 | 1.037 | 1.037 |
| $\epsilon(d'_1 d''_1)$ | 1.059 | 0.27 | 1.048 | 1.049 | .908 |
| <u>Facteurs de Landé</u> | | | | | |
| $g(d'_4, 7/2; 4)$ | 1.251 (⁸⁹) | 1.250 | 1.25 | 1.25 | 1.25 |
| $g(d_4, 7/2; 3)$ | 1.040 | 1.036 | 1.037 | 1.037 | 1.037 |
| $g(d''_1, 5/2; 3)$ | 1.248 | 1.261 | 1.261 | 1.26 | 1.260 |
| $g(d'_1, 5/2; 2)$ | 0.999 | 0.966 | .965 | .965 | .965 |

beaucoup plus important que ne le prévoit notre modèle II (notre modèle donne une contamination de $3 \cdot 10^{-3}$ de ces niveaux l'un par l'autre alors que les résultats de GRYNBERG accréditent une contamination de 4×10^{-2}).

Nous avons également, dans ce modèle, reporté les ajustements des paramètres G_3 et ζ_d correspondant aux différentes assignations les plus probables des signaux observés

Pour chacune des valeurs de paramètres donnant le meilleur ajustement, nous avons calculé les facteurs de Landé et les structures fines. (Nous avons essayé un grand nombre d'autres assignations qui se sont avérées beaucoup plus mauvaises que celles présentées ici).

La valeur de l'écart quadratique moyen entre les positions calculées et celles mesurées semble privilégier les options β et γ ; la comparaison des structures fines aux données expérimentales contribue à préférer l'option β . En tout état de cause, des résultats expérimentaux supplémentaires semblent indispensables pour pouvoir tirer une conclusion incontestable.

Nous avons ensuite étudié en détail les diverses interactions magnétiques (¹⁰⁶) (spin-spin; spin-autre orbite) pour voir si l'introduction d'une nouvelle interaction de ce type pouvait rendre compte de l'écart entre notre modèle et l'expérience. Ces essais ne se sont pas avérés totalement concluants et significatifs à l'heure actuelle, mais semblent prouver que la valeur de ζ_d déterminée dans l'approximation II est une valeur minimale.

Nous avons enfin introduit l'effet diamagnétique (quadratique en champ); la perturbation qu'il apporte au diagramme Zeeman est minime (de l'ordre du 1°/∞), l'amélioration ainsi apportée à l'ajustement est minime (Les valeurs des intégrales radiales $\langle p || r^2 || p \rangle$ et $\langle d || r^2 || d \rangle$ qui optimisent l'ajustement sont à 50% près de l'ordre de 5 et 500 unités atomiques, ce qui est en accord très raisonnable avec les calculs par méthode Hartree-Fock.)

En conclusion, cette expérience de croisements de niveaux nous a permis de mettre en évidence un écart très notable au couplage de Racah de la configuration $2p^5 4d$. Nous avons pu en rendre compte dans un modèle phénoménologique qui nous fournit des valeurs de facteurs de Landé présentant un écart notable (de l'ordre de 3% en moyenne) par rapport aux valeurs obtenues en couplage pur.

Nous avons enfin montré que l'amélioration de la description des structures fines des doublets étudiés nécessitait de manière impérative la prise en compte de l'interaction spin-orbite externe. La méthode paramétrique nous conduit à une valeur minimale de l'interaction spin-orbite de l'électron externe de l'ordre de 0.4 cm^{-1} au moins. L'analyse plus fine de ces résultats, de même que la confirmation ou l'infirmité des conclusions avancées ici, nécessite de plus amples informations expérimentales tant sur les valeurs des structures en champ nul que sur les facteurs de Landé. La mesure de la structure en champ nul par spectroscopie à deux photons est en cours (¹⁰⁷). La mesure, par d'autres techniques, des facteurs de Landé en champ faible serait souhaitable.

Nous projetons personnellement de reprendre la même étude de croisements de niveaux sur la configuration $2p^5 3d$ pour voir si l'effet mis en évidence est systématique ou accidentel.



CONCLUSION

L'expérience de "beam-gas spectroscopy" que nous avons mise au point nous a donc permis de réaliser des déterminations de très grande précision de la position des croisements de niveaux de structure fine des multiplets 3P de l'hélium.

L'analyse de ces résultats a nécessité une étude approfondie de l'effet Zeeman des atomes à plusieurs électrons. Nous avons utilisé dans ce but la formulation de BREIT généralisée par HEGSTRÖM pour tenir compte du premier ordre des corrections radiatives. Dans le cadre de cette formulation, nous avons calculé les effets croisés des corrections relativistes, des corrections radiatives et des effets de recul du noyau jusqu'aux ordres $\alpha^3 \mu_B H$ et $\alpha^2 \frac{m}{M} \mu_B H$.

La forme non relativiste de ce hamiltonien apparaît très complexe. Nous avons montré dans le chapitre II qu'elle recouvrait en fait essentiellement deux phénomènes physiques dont il était possible de donner une explication satisfaisante dans le cadre de l'électrodynamique classique (en supposant les particules classiques ponctuelles et douées de moments cinétiques et magnétiques intrinsèques). Ces deux phénomènes sont respectivement l'interaction du moment magnétique intrinsèque (et du moment dipolaire électrique induit par le mouvement) avec les divers champs magnétiques (et électriques) internes et externes à l'atome, et la précession de Thomas des spins attachés à des particules accélérées. Les calculs menés intégralement dans le cadre de l'électrodynamique classique redonnent à l'ordre $1/c^3$ inclus les mêmes résultats que la formulation de HEGSTRÖM.

Dans le cadre de cette théorie, nous avons alors analysé en détail nos résultats expérimentaux concernant les croisements de niveaux des multiplets 3P . Nos résultats sur le niveau 2^3P sont en excellent accord avec les résultats obtenus à Yale (7) par résonance magnétique; ils permettent d'améliorer notablement la détermination du facteur de Landé g'_L de ce niveau. Cette nouvelle détermination semble confirmer le désaccord avec la valeur calculée par LEWIS (47). D'après

l'analyse que nous en avons fait dans le chapitre III, ce n'est vraisemblablement pas le hamiltonien Zeeman utilisé par LEWIS qui semble en cause, mais plutôt la qualité des fonctions d'ondes. Un nouveau calcul avec des fonctions d'ondes plus raffinées serait souhaitable, de même que l'estimation précise sur ces mêmes fonctions d'ondes des corrections explicitées dans ce mémoire, à savoir les effets croisés des corrections relativistes des corrections radiatives et de celles de recul du noyau.

Pour les niveaux $n = 3$ et 4 , nous avons pu améliorer la précision de la détermination de la valeur du grand intervalle de structure fine ($J = 0 - J = 2$). Les résultats sont en bon accord avec les résultats théoriques les plus récents (51).

Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, le montage réalisé offre maintenant la possibilité d'une étude de très grande précision de la structure fine et hyperfine de ^3He . Une telle étude, très intéressante expérimentalement, pose encore des problèmes théoriques non résolus.

En ce qui concerne les mesures de précision sur les systèmes simples, nous avons entrepris avec N. BILLY, sur le montage présenté dans ce mémoire, une étude approfondie de l'effet Zeeman du niveau $n = 4$ de He^+ . L'étude du niveau $n = 3$ de He^+ qui doit apporter des résultats expérimentaux originaux est en projet.

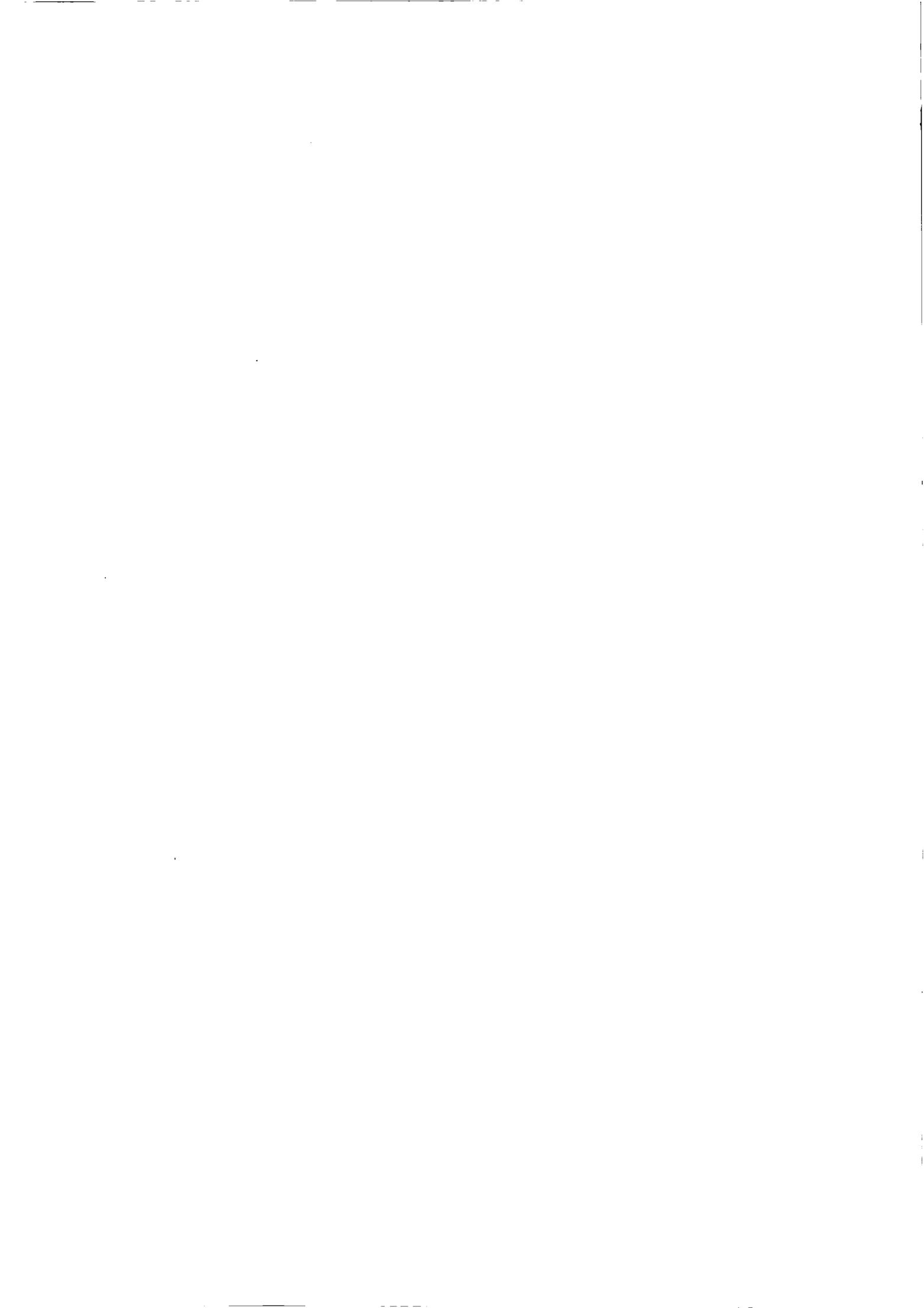
En ce qui concerne les systèmes atomiques plus complexes tant du point de vue expérimental que théorique, notre travail sur le Néon constitue une première approche.

Nous avons pu mesurer un certain nombre de croisements de niveaux de deux multiplets de la configuration $2p^5 4d$ ($4d'_4 - 4d_4$; $4d'_1 - 4d''_1$). L'analyse des résultats nous a permis de montrer que le couplage des niveaux étudiés est vraisemblablement beaucoup plus complexe qu'il était supposé jusqu'ici. L'introduction de l'interaction spin-orbite de l'électron externe jusqu'ici supposée négligeable a considérablement réduit le désaccord entre expériences et théorie sans toutefois apporter une explication totalement satisfaisante.

Sur le plan expérimental, nous projetons de reprendre la même expérience sur les configurations $2p^5 3d$ et $2p^5 5d$ si possible pour voir si l'effet mis en évidence est systématique ou accidentel. Dans les configurations $2p 4d$ et les configurations plus excitées, la quasi dégénérescence avec des états de parité opposée doit permettre d'élargir cette étude par utilisation d'une

technique d'anticroisements de niveaux (par perturbation électrique). Cette technique doit nous ouvrir la possibilité d'une étude systématique des configurations excitées du Néon et éventuellement des autres gaz rares.

Les difficultés que nous avons rencontrées dans l'étude du Néon tiennent vraisemblablement à deux types d'effets incorrectement pris en compte : effets relativistes et effets de corrélations électroniques. De façon générale, la grande sensibilité à ces paramètres de l'information expérimentale que nous recueillons en fait donc un test très sévère des modèles atomiques utilisés et donne tout leur intérêt tant aux mesures expérimentales d'effet Zeeman qu'à son étude théorique.



APPENDICE I

Dans cet appendice, nous rassemblons un certain nombre de propriétés du tenseur $\vec{\Omega}$ qui est défini par la formule

$$\vec{\Omega} = \vec{U} - \frac{\gamma}{\gamma + 1} \vec{\beta} \vec{\beta} \quad (\text{A.I-1})$$

où \vec{U} représente le tenseur unité, $\vec{\beta} = \vec{v}/c$ et $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$.

Ce tenseur (défini dans R^3) est très utile pour formuler les transformations de Lorentz car il décrit les effets d'une contraction de Lorentz. Appliqué à un vecteur \vec{A} arbitraire, il donne en effet :

$$\vec{\Omega} \vec{A} = \vec{A}_{\perp} + \sqrt{1 - \beta^2} \vec{A}_{\parallel}$$

où \vec{A}_{\perp} (et \vec{A}_{\parallel}) sont respectivement les composantes de \vec{A} perpendiculaires (parallèles) au vecteur $\vec{\beta} = \vec{v}/c$.

Le tenseur $\vec{\Omega}^{-1}$ qui s'écrit :

$$\vec{\Omega}^{-1} = U + \frac{\gamma^2}{\gamma + 1} \vec{\beta} \vec{\beta} \quad (\text{A.I-2})$$

permet d'écrire les formules de passage des composantes d'un quadrivecteur A ($A_1^0 \vec{A}_1$) mesurées dans un référentiel d'inertie R_1 à celles ($A_2^0 \vec{A}_2$) mesurées dans un référentiel R_2 animé par rapport à R_1 d'une vitesse uniforme $\vec{v} = c\vec{\beta}$ sous la forme :

$$A_2 = \Lambda(\vec{\beta}) A_1 \quad (\text{A.I-3})$$

expression qui s'explicité sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_2^0 = \gamma(A_1^0 - \vec{\beta} \cdot \vec{A}_1) \\ \vec{A}_2 = \vec{\Omega}^{-1} \vec{A}_1 - \gamma \vec{\beta} A_1^0 \end{array} \right. \quad (\text{A.I-4})$$

De la même façon, on peut écrire les formules de transformation d'un tenseur antisymétrique A de composantes spatio-temporelles $\vec{X} (A^{01}, A^{02}, A^{03})$ et de composantes spatiales $\vec{Y} = (A^{23}, A^{31}, A^{12})$ sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{X}_2 = \gamma (\vec{\Omega} \cdot \vec{X}_1 + \vec{\beta} \wedge \vec{Y}_1) \\ \vec{Y}_2 = \gamma (\vec{\Omega} \cdot \vec{Y}_1 - \vec{\beta} \wedge \vec{X}_1) \end{array} \right. \quad (\text{A.I-5})$$

Ce sont ces formules qui nous serviront pour la transformation des champs ou des moments magnétiques dipolaires par exemple.

Des expressions (A.I-1) et (A.I-2), il est facile de tirer quelques expressions utiles :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \vec{\beta} &= \gamma^{-1} \vec{\beta} \\ \vec{\Omega}^{-1} \vec{\beta} &= \gamma \vec{\beta} \\ \vec{\beta} \wedge \vec{\Omega} \vec{a} &= \vec{\beta} \wedge \vec{a} \\ \vec{\Omega} (\vec{a} \wedge \vec{b}) &= \gamma^{-1} (\vec{\Omega}^{-1} \vec{a}) \wedge (\vec{\Omega}^{-1} \vec{b}) \\ \vec{\Omega}^{-1} (\vec{a} \wedge \vec{b}) &= \gamma (\vec{\Omega} \cdot \vec{a}) \wedge (\vec{\Omega} \cdot \vec{b}) \end{aligned}$$

Remarquons enfin que $\vec{\Omega}$ (resp $\vec{\Omega}^{-1}$) sont des tenseurs symétriques.

Pour tout vecteur \vec{a} , on a :

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \vec{a} &= \vec{a} \vec{\Omega} \\ |\vec{\Omega}| &= \gamma^{-1} \end{aligned}$$

APPENDICE II

POTENTIELS ET CHAMPS RETARDÉS CRÉÉS PAR DES MOMENTS MAGNÉTIQUES EN MOUVEMENT

Comme nous l'avons montré dans le chapitre II, un moment dipolaire magnétique en mouvement se manifeste non seulement par un moment dipolaire magnétique contracté :

$$\vec{\mu}_i = g_i \mu_{0i} \gamma_i \vec{\Omega}_i \vec{S}_i \quad (\text{A.II-1})$$

mais également par un moment dipolaire électrique :

$$\vec{v}_i = \frac{\gamma_i \vec{\beta}_i}{c} \wedge g_i \mu_{0i} \vec{S}_i = \frac{1}{c} \vec{\beta}_i \wedge \vec{\mu}_i \quad (\text{A.II-2})$$

Un milieu de particules douées de spin en mouvement se manifeste donc par une densité de polarisation :

$$\vec{P}(\vec{R}(t)) = \sum_i \frac{\vec{\beta}_i \wedge \vec{\mu}_i}{c} \delta^3(\vec{R}_i - \vec{R}) = \sum_i \vec{v}_i \delta^3(\vec{R}_i - \vec{R}) \quad (\text{A.II-3})$$

et une densité de magnétisation :

$$\vec{M}(\vec{R}(t)) = \sum_i \vec{\mu}_i \delta^3(\vec{R}_i - \vec{R}) \quad (\text{A.II-4})$$

En présence de densité de charge ρ , de densité de courants \vec{j} , de polarisation \vec{P} et de magnétisation \vec{M} , les équations de Maxwell se mettent sous la forme (dans les unités E.S non rationalisées utilisées dans le chapitre II) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi (\rho - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}) \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c^2} (\vec{j} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{M}) \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \\ \vec{\nabla} \wedge \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.II-5})$$

D'où l'on déduit les équations des potentiels sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \phi = -4\pi (\rho - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}) \\ \square \vec{A} = -\frac{4\pi}{c^2} \left(\vec{j} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \vec{\nabla} \wedge \vec{M} \right) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(A.II-6)} \\ \text{(A.II-7)} \end{array}$$

Le problème des potentiels retardés liés aux termes sources ρ et j est déjà résolu (cf. réf. (32)). Nous chercherons à résoudre de la même façon les problèmes posés par les termes sources liés au tenseur de polarisation (\vec{P}, \vec{M}) . Pour cela, utilisant la méthode du superpotentiel, nous chercherons des potentiels $\vec{\pi}$ et $\vec{\pi}^*$ obéissant aux équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \vec{\pi} = -4\pi \vec{P} \\ \square \vec{\pi}^* = -4\pi \vec{M} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(A.II-8)} \\ \text{(A.II-9)} \end{array}$$

Les fonctions ϕ et \vec{A} définies par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\pi} \\ \vec{A} = +\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{\pi}}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \text{rot } \vec{\pi}^* \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(A.II-10)} \\ \text{(A.II-11)} \end{array}$$

satisfont alors aux équations (II-6) et (II-7) avec les termes sources du tenseur de polarisation (\vec{P}, \vec{M}) et à la condition de jauge de Lorentz.

Or les équations (II-8) et (II-9) sont formellement identiques à l'équation :

$$\square \vec{A} = -\frac{4\pi \vec{j}}{c^2}$$

dont la résolution est à la base de la détermination des potentiels obtenus dans le paragraphe A du chapitre II (voir réf. (32)).

Procédant de la même façon, nous obtenons les superpotentiels retardés $\vec{\pi}$ et $\vec{\pi}^*$ au point \vec{R} à l'instant t sous la forme :

$$\vec{\pi}(\vec{R}, t) = + \int \frac{\vec{P}(\vec{R}', t')}{r(t')} \delta\left(t - t' - \frac{r(t')}{c}\right) dt' \quad \text{(A.II-12)}$$

où $r(t') = |\vec{R} - \vec{R}'|$

et

$$\vec{\pi}^{\star}(\vec{R}, t) = + \int \frac{\vec{M}(\vec{R}', t')}{r(t')} \delta(t-t' - \frac{r(t')}{c}) dt' \quad (\text{A.II-13})$$

Suivant la méthode exposée par de GROOT (32) après développement de Taylor de $\delta(t-t' - \frac{r(t')}{c})$ autour du point $(t-t')$, on obtient les développements des superpotentiels $\vec{\pi}$ et $\vec{\pi}^{\star}$ créés au point i par l'ensemble des charges \vec{j} sous la forme d'une série en $1/c$ dont les premiers termes sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\pi}^{(0)} = \vec{\pi}^{(1)} = 0 \\ \vec{\pi}^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{v}_j}{r_{ij}} \\ \vec{\pi}^{(3)} = - \sum_{j \neq i} \frac{\vec{v}_j}{c} \end{array} \right. \quad \text{car } \vec{v}_j \text{ est d'ordre } 1/c^2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\pi}^{\star(0)} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{\mu}_j}{r_{ij}} \\ \vec{\pi}^{\star(1)} = - \sum_{j \neq i} \frac{\vec{\mu}_j}{c} \end{array} \right.$$

d'où nous tirons l'expression des potentiels :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi^{(0)} = \phi^{(1)} = 0 \\ \phi^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{v}_j \cdot \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \\ \phi^{(3)} = 0 \\ \vec{A}^{(0)} = \vec{A}^{(1)} = 0 \\ \vec{A}^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{\mu}_j \wedge \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \\ \vec{A}^{(3)} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.II-14})$$

l'expression des champs s'en déduit directement; nous n'explicitons ici que les termes dont nous aurons besoin, à savoir le champ électrique dû au spin jusqu'à l'ordre $1/c$ seulement et le champ magnétique jusqu'à l'ordre $1/c^3$:

$$\vec{E}^{(0)} = \vec{E}^{(1)} = 0$$

$$\vec{B}^{(0)} = \vec{B}^{(1)} = 0$$

$$\vec{B}^{(2)} = \frac{1}{c^2} \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{3(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^5} - \frac{\vec{\mu}_j}{r_{ij}^3} \right\}$$

(A.II-15)

$$\vec{B}^{(3)} = 0$$

APPENDICE III

METHODES GRAPHIQUES APPLIQUEES A L'ALGEBRE DES MOMENTS ANGULAIRES

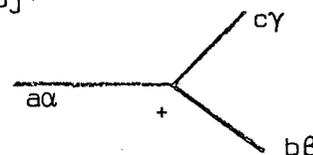
Les méthodes graphiques qui peuvent apporter des simplifications considérables aux calculs de couplage de moments cinétiques ont été introduites par LEVINSON et étudiées par un grand nombre d'auteurs : il y a lieu de citer les livres originaux de YUTSIS, LEVINSON et VANAGAS ⁽¹⁾ et de YUTSIS et BAUDZAITIS ⁽²⁾, les extensions de la méthode proposées par DÖNAU et FLACH ⁽³⁾ et EL BAZ, MASSOT et LAFOUCRIERE ⁽⁴⁾.

On trouvera un exposé rapide et très pédagogique dans l'article de SANDARS ⁽⁵⁾. Nous nous contenterons donc ici de rappeler quelques résultats utiles pour la compréhension des calculs du chap. III.

1°) Le principe de la représentation graphique est basé sur l'isomorphisme vis-à-vis des permutations entre le symbole $3j$

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix}$$

et le graphe orienté



l'orientation du noeud est dénoté par un signe + pour une description dans le sens direct des vecteurs du couplage (et - pour le sens rétrograde).

N'importe quelle déformation géométrique qui préserve l'orientation du noeud ne change pas le coefficient $3j$ représenté par le diagramme.

A un changement de signe du noeud (ou d'ordre cyclique dans la permutation des vecteurs) est associé un changement de phase $(-1)^{a+b+c}$.

2°) Un coefficient $3j$ dont l'un des moments angulaires est nul se réduit à un symbole antisymétrique (tenseur métrique)

$$\begin{pmatrix} a & b & 0 \\ \alpha & \beta & 0 \end{pmatrix} = (2a+1)^{-1/2} \delta(a,b) \begin{pmatrix} a \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} = (-1)^{a+\alpha} \delta(\alpha, -\beta) \delta(a,b) (2a+1)^{-1/2}$$

relation représentée graphiquement par :

$$\begin{array}{c} \text{0} \\ \diagup \\ \text{---} \text{a}\alpha \text{---} + \\ \diagdown \\ \text{b}\beta \end{array} = \begin{array}{c} \text{b}\beta \\ \diagup \\ \text{---} \text{a}\alpha \text{---} - \\ \diagdown \\ \text{0} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{a}\alpha \text{---} \rightarrow \\ \text{b}\beta \end{array} \times (2a+1)^{-1/2}$$

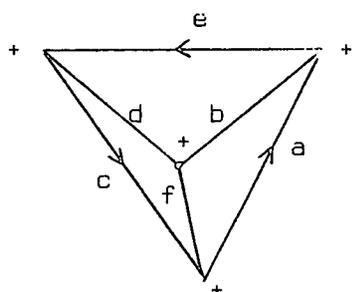
un changement de sens d'une ligne telle celle ci-dessus conduit à l'apparition d'un facteur de phase $(-1)^{2a}$.

3°) Par contraction de symbole $(3jm)$ on construit ainsi les $6j \dots 3(n-1)j$.

Ainsi, on a par exemple :

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a & b & e \\ d & c & f \end{array} \right\} = \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma \\ \delta, \epsilon, \phi}} (-1)^{a+e+c-\alpha-\epsilon-\gamma} \begin{pmatrix} a & f & c \\ \alpha & \phi & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & d & e \\ \gamma & \delta & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & b & a \\ \epsilon & \beta & -\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix}$$

relation qui donne une des multiples représentations équivalentes du coefficient $6j$



Remarques

- les flèches du périmètre sont dirigées dans le sens direct
- le noeud intérieur n'a pas de flèches.
(ce qui signifie que les lignes peuvent être soit toutes entrantes, soit toutes sortantes).

Un symbole $3(n-1)j$ est ainsi représenté par un diagramme où toutes les lignes sont liées alors qu'un $(3jm)$ généralisé présente des lignes libres.

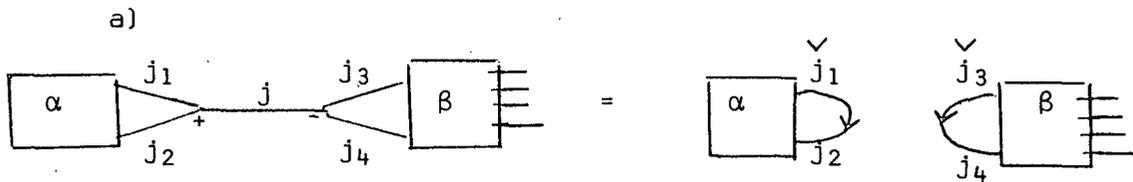
4°) Le diagramme représentant le coefficient $3(n-1)j$ qui intervient dans un changement de schéma de couplage (problème posé dans le chapitre III) s'obtient mécaniquement en respectant les règles suivantes :

- les noeuds associés aux triades apparaissant du côté droit de la matrice de passage sont de signes positifs, l'orientation des lignes du graphe devant respecter l'ordre du couplage correspondant; les lignes représentant les moments angulaires à coupler sont dirigées ver le noeud, la ligne représentant la résultante étant au contraire sortante.
- les conventions sont strictement inversées pour les triades apparaissant du côté gauche de la matrice et les lignes corres-

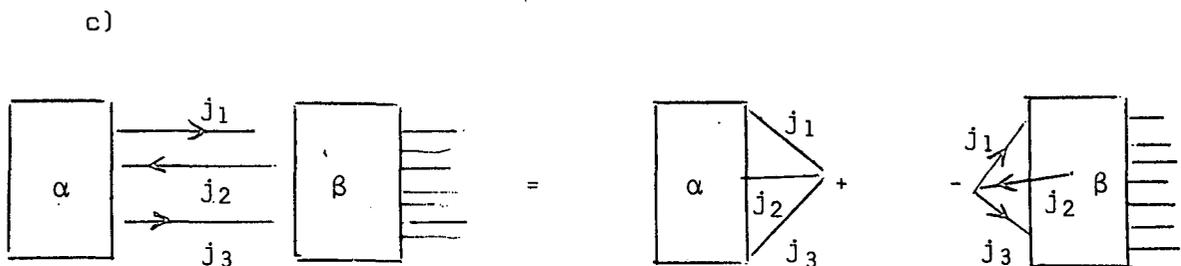
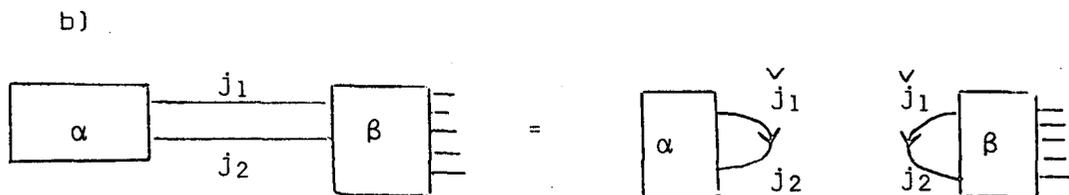
pondantes des 2 demi-diagrammes sont contractées.

5°) La réduction des $3(n-1)j$ fait intervenir le théorème fondamental de YUTSIS, LEVINSON, VANAGAS dit de "pincement des lignes liées" qui démontre que tout diagramme séparable en trois lignes au moins peut se factoriser en diagrammes plus simples obtenus par "pincement des lignes liées".

Ainsi, on a les égalités suivantes :



les notations $\check{j}_1 = [2j_1+1]^{-1/2}$ (resp. $\hat{j}_1 = [2j_1+1]^{1/2}$) servent à mémoriser l'existence des facteurs de pondération utiles dans de telles séparations.



qui sont les trois égalités fondamentales utilisées dans la réduction des diagrammes.

Remarque : dans le théorème c, il importe de rendre les flèches pincées de même signe dans le diagramme fermé α (associé au noeud +), le diagramme associé à β (-) respectant l'orientation originale des lignes (cf. ref. (4), page 58).

Bibliographie

- (1) . A.P. YUTSIS, I.B. LEVINSON, V. VANAGAS - (1962) "Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum"
- (2) A. BANDZAITIS et A.P. YUTSIS - (1965) "A Quantum Theory of Angular Momentum (Moscow)"
- (3) F. DONAU et G. FLACH - Nuclear Physics, (1965), 69, 68
- (4) E. EL BAZ, J. LAFOUCRIERE, B. CASTEL - (1969) "Traitement graphique de l'algèbre des moments angulaires" (Masson et Cie, Paris)
- (5) P.G. H. SANDARS - "Graphical Methods in Angular Momentum Theory in Atomic Physics and Astrophysics"; 1969 Brandeis University Summer Institute in Theoretical Physics (Gordon and Breach, New York - London - Paris).

APPENDICE IV

INTERACTION ELECTROSTATIQUE (CONFIGURATION $2p^5 4d + 2p^5 5s$)

Interaction électrostatique (couplage LS)

Configurations $2p^5$ ($4d + 5s$)

Les niveaux dotés d'une astérisque sont ceux de la configuration $2p^5 5s$.

Les diverses intégrales radiales ont été définies dans le chapitre VI, § A a, b.

| | | | | | |
|-----------|-----------|-----------------|---|-----------|--------------|
| | | | 3F_4 | | |
| | | | <div style="border: 1px dashed black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> $-2F_2$ </div> | | |
| | 3D_3 | 1F_3 | 3F_3 | | |
| 3D_3 | $7F_2$ | 0 | 0 | | |
| 1F_3 | | $-2F_2 + 90G_3$ | 0 | | |
| 3F_3 | | | $-2F_2$ | | |
| | 3P_2 | 1D_2 | 3D_2 | 3F_2 | ${}^3P_2^*$ |
| | $-7F_2$ | 0 | 0 | 0 | $\sqrt{2} J$ |
| | | $7F_2$ | 0 | 0 | 0 |
| | | | $7F_2$ | 0 | 0 |
| | | | | $-2F_2$ | 0 |
| | | | | | $-3G'_1 + S$ |

| 1P_1 | 3P_1 | 3D_1 | ${}^1P_1^*$ | ${}^3P_1^*$ |
|-----------------|-----------|-----------|-------------------|--------------|
| $-7F_2 + 20G_1$ | 0 | 0 | $\sqrt{2} (J-2K)$ | 0 |
| | $-7F_2$ | 0 | 0 | $\sqrt{2} J$ |
| | | $+7F_2$ | 0 | 0 |
| | | | $-G'_1 + S$ | 0 |
| | | | | $-3G'_1 + S$ |

| 3P_0 | ${}^3P_0^*$ |
|-----------|--------------|
| $-7F_2$ | $\sqrt{2} J$ |
| | $-3G'_1 + S$ |

Interaction électrostatique (couplage JK)

Les différents niveaux sont repérés par leurs nombres quantiques $|j_1, K, J \rangle$.

Les niveaux dotés d'une astérisque sont ceux des configurations $2p^5 5s$

$$|3/2, 7/2; 4 \rangle$$

$$-2F_2$$

$$|3/2, 7/2; 3 \rangle$$

$$|3/2, 5/2; 3 \rangle$$

$$|1/2, 5/2; 3 \rangle$$

| | | |
|-----------------------------|----------------------------|--|
| $-2F_2 + \frac{120}{7} G_3$ | $\frac{20\sqrt{6}}{7} G_3$ | $-\frac{60}{\sqrt{21}} G_3$ |
| | $5F_2 + \frac{20}{7} G_3$ | $\sqrt{14} F_2 - 10\sqrt{\frac{2}{7}} G_3$ |
| | | $10 G_3$ |

| | | | | |
|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|
| $ 3/2, 3/2; 2 \rangle$ | $ 3/2, 5/2; 2 \rangle$ | $ 1/2, 5/2; 2 \rangle$ | $ 1/2, 3/2; 2 \rangle$ | $ 3/2, 3/2; 2 \rangle^*$ |
| 0 | 0 | 0 | $-7F_2$ | J |
| | $5F_2$ | $\sqrt{14} F_2$ | 0 | 0 |
| | | 0 | 0 | 0 |
| | | | 0 | J |
| | | | | S - $3G'_1$ |

$$|3/2, 1/2; 1 \rangle$$

$$|3/2, 3/2; 1 \rangle$$

$$|1/2, 3/2; 1 \rangle$$

| | | |
|----------------------------|--------------------|----------------------------|
| $-7F_2 + \frac{20}{3} G_1$ | $\frac{20}{3} G_1$ | $\frac{20}{3} G_1$ |
| | $\frac{20}{3} G_1$ | $-7F_2 + \frac{20}{3} G_1$ |
| | | $\frac{20}{3} G_1$ |

Seuls sont consignés dans ce tableau les niveaux pris en compte dans l'optimisation du paragraphe D (chap. VI).

APPENDICE V

INTERACTIONS SPIN-ORBITE (CONFIGURATION $2p^54d + 2p^55s$)

Interaction spin-orbite (couplage jK)

Les niveaux dotés d'une astérisque sont ceux de la configuration $2p^55s$

$$|3/2, 7/2; 4 \rangle$$

$$\boxed{-\frac{\zeta_p}{2} + \zeta_d}$$

$$|3/2, 7/2; 3 \rangle$$

$$|3/2, 5/2; 3 \rangle$$

$$|1/2, 5/2; 3 \rangle$$

| | | |
|---|---|---------------------|
| $-\frac{\zeta_p}{2} - \frac{9}{7}\zeta_d$ | $\frac{2\sqrt{6}}{7}\zeta_d$ | 0 |
| | $-\frac{\zeta_p}{2} + \frac{11}{14}\zeta_d$ | 0 |
| | | $\zeta_p + \zeta_d$ |

$|3/2, 3/2; 2 \rangle \quad |3/2, 5/2; 2 \rangle \quad |1/2, 5/2; 2 \rangle \quad |1/2, 3/2; 2 \rangle \quad |3/2, 3/2; 2 \rangle^*$

| | | | | |
|--|--|---------------------------------|----------------------------------|-----------------------|
| $-\frac{\zeta_p}{2} + \frac{3}{5} \zeta_d$ | $\frac{\sqrt{21}}{5} \zeta_d$ | 0 | 0 | 0 |
| | $-\frac{\zeta_p}{2} - \frac{11}{10} \zeta_d$ | 0 | 0 | 0 |
| | | $\zeta_p - \frac{7}{5} \zeta_d$ | $\frac{\sqrt{6}}{5} \zeta_d$ | 0 |
| | | | $\zeta_p + \frac{9}{10} \zeta_d$ | 0 |
| | | | | $-\frac{\zeta'_p}{2}$ |

 $|3/2, 1/2; 1 \rangle$
 $|3/2, 3/2; 1 \rangle$
 $|1/2, 3/2; 1 \rangle$

| | | |
|--|--------------------------------|---------------------------------|
| $-\frac{\zeta_p}{2} + \frac{\zeta_d}{2}$ | ζ_d | 0 |
| | $-\frac{\zeta_p}{2} - \zeta_d$ | 0 |
| | | $\zeta_p - \frac{3}{2} \zeta_d$ |

Seuls sont consignés dans ce tableau les niveaux pris en compte dans l'optimisation du paragraphe D (chap. VI).

APPENDICE VI

EFFET ZEEMAN ET INTERACTION DIAMAGNETIQUE

Effet Zeeman

Nous réservant la possibilité d'introduire une description semi-phénoménologique du diagramme Zeeman observé, nous avons écrit le Hamiltonien Zeeman sous la forme :

$$\mathcal{H}_Z = \left\{ g_{sp} s_{1z} + g_{lp} l_{1z} + g_{sd} s_{2z} + g_{ld} l_{2z} \right\} \mu_B H \quad (\text{A.VI-1})$$

Ces opérateurs ne représentent pas toutes les formes de dépendance angulaire possibles du hamiltonien linéaire en champ magnétique; comme nous l'avons montré pour l'hélium, une description plus raffinée devrait faire intervenir des opérateurs effectifs de la forme $\{ s_i C_i^2 \}^{(1)}$ prenant en compte les effets des corrélations électroniques et des corrections relativistes. En réalité, au niveau de précision obtenu dans l'interprétation théorique, l'introduction de tels effets n'apporte par une amélioration significative; nous nous contenterons donc dans ce qui suit d'explicitier le hamiltonien (A.VI-1) ci-dessus.

Les éléments de matrice des différents opérateurs vectoriels s'écrivent sous la forme :

$$\langle j_1, K, J, M_J | V_0^1 | j'_1, K', J', M'_J \rangle = (-1)^{J-M} \begin{Bmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{Bmatrix} \langle j_1, K, J || V^1 || j'_1, K', J' \rangle$$

les différents éléments de matrice réduits étant donnés par les formules :

$$\langle j_1, K, J || l_1 || j'_1, K', J' \rangle = \delta_{l_2 l_2} \delta_{l_1 l'_1} (-1)^{J'+K+K'+j_1+j'_1+1} \sqrt{6 [J] [J'] [K] [K'] [j_1] [j'_1]} \times \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ J' & \frac{1}{2} & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j'_1 \\ K' & l_2 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ j'_1 & \frac{1}{2} & j_1 \end{Bmatrix}$$

$$\langle j_1, K, J || s_1 || j'_1, K', J' \rangle = \delta_{l_1 l'_1} \delta_{l_2 l'_2} (-1)^{J'+K+K'+2j_1+l_2+1} \sqrt{\frac{3}{2} [J] [J'] [K] [K'] [j_1] [j'_1]} \times \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ J' & \frac{1}{2} & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j'_1 \\ K' & l_2 & K \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ j'_1 & 1 & j_1 \end{Bmatrix}$$

$$\langle j_1, K, J || \ell_2 || j', K', J' \rangle = \delta_{j_1 j'_1} \delta_{\ell_2 \ell'_2} (-1)^{J'+2K+j_1+s_2+\ell'_2}$$

$$\sqrt{\ell_2(\ell_2+1)(2\ell_2+1) [J][J'] [K][K']} \times \begin{Bmatrix} K & 1 & K' \\ J' & \frac{1}{2} & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell_2 & 1 & \ell_2 \\ K' & j_1 & K \end{Bmatrix}$$

$$\langle j_1, K, J || s_2 || j'_2, K', J' \rangle = \delta_{j_1 j'_1} \delta_{KK'} \delta_{\ell_2 \ell'_2} \sqrt{\frac{3}{2} [J][J']} (-1)^{J+K+s_2+1} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ J' & K & J \end{Bmatrix}$$

Ces éléments de matrice réduits ont été évalués par ces formules grâce au programme AGENAC (réalisé au laboratoire Aimé Cotton par A. CARLIER et Y. BORDARIER[☆]).

Nous reportons les éléments de matrice de ces quatre opérateurs dans les tableaux suivants où nous avons introduit les notations ci-dessous pour les termes non diagonaux :

$$xm_4 = \sqrt{16 - m^2}$$

$$xm_3 = \sqrt{9 - m^2}$$

$$xm_2 = \sqrt{4 - m^2}$$

☆) Programme AGENAC : calcul des formules suivant l'algèbre de Racah. Brochure disponible au laboratoire Aimé Cotton.

Matrice de T_{12}

| J | 4 | 3 | 3 | 3 | 2* | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 |
|---|----------------------------|----------------------------|----------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| k | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ |
| | $\frac{m}{4}$ | $\frac{2mm^4}{28}$ | $\frac{\sqrt{6}mm^4}{21}$ | $\frac{2mm^4}{2\sqrt{21}}$ | | | | | | | | |
| | $\frac{9m}{28}$ | $-\frac{2mm}{2\sqrt{6}}$ | $-\frac{mm}{6\sqrt{21}}$ | $\frac{4\sqrt{6}mm^3}{63}$ | $\frac{2mm^3}{3\sqrt{21}}$ |
| | | $\frac{13m}{63}$ | $-\frac{2\sqrt{15}m}{63}$ | $-\frac{14mm^5}{15\sqrt{21}}$ | $\frac{13mm^5}{315}$ | $-\frac{2\sqrt{14}mm^3}{315}$ |
| | | $\frac{2m}{9}$ | | $-\frac{1}{15}\sqrt{\frac{2}{3}}mm^3$ | $-\frac{2}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm^3$ |
| | | | | $\frac{m}{10}$ | $-\frac{1}{15}\sqrt{\frac{2}{3}}m$ | $\frac{m}{15\sqrt{6}}$ |
| | | | | | $\frac{13m}{45}$ | $-\frac{2\sqrt{14}m}{45}$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ | $-\frac{4}{45}\sqrt{\frac{2}{3}}mm$ |
| | | | | | | $\frac{14m}{45}$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ | $-\frac{4}{15\sqrt{6}}mm$ |
| | | | | | | | $\frac{mm}{6}$ | $-\frac{2mm}{15}$ | $-\frac{2mm}{15}$ | $-\frac{2mm}{15}$ | $-\frac{2mm}{15}$ | $-\frac{2mm}{15}$ |
| | | | | | | | $-\frac{mm}{3}$ | $\frac{mm}{6}$ | $\frac{mm}{6}$ | $\frac{mm}{6}$ | $\frac{mm}{6}$ | $\frac{mm}{6}$ |
| | | | | | | | | $-\frac{mm}{3}$ | $-\frac{mm}{3}$ | $-\frac{mm}{3}$ | $-\frac{mm}{3}$ | $-\frac{mm}{3}$ |
| | | | | | | | | | | | | $\frac{mm}{6}$ |

matric do Pez

| J | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 |
|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| $\frac{7}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{7}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ | $\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ |
| $\frac{m}{8}$ | $-\frac{2m}{8}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | $-\frac{m}{8}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | $\frac{1}{6}m$ | 0 | 0 | $-\frac{2m}{6}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | | $\frac{m}{6}$ | 0 | $-\frac{2m}{6}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | | | $\frac{m}{4}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | | | | $\frac{m}{6}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | | | | | $\frac{m}{4}$ | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | | | | | | | $\frac{m}{4}$ | 0 | 0 | 0 |
| | | | | | | | | $\frac{m}{2}$ | 0 | 0 |
| | | | | | | | | | $-\frac{m}{4}$ | 0 |
| | | | | | | | | | | $-\frac{m}{4}$ |

Interaction diamagnétique

Le hamiltonien diamagnétique s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{H}_d = \frac{(\mu_B H)^2}{6R_\infty} \sum_i (1 - C_{oi}^2) r_i^2$$

Seul le terme anisotrope influe sur la position des croisements de niveaux; nous donnons dans les deux tableaux suivants les éléments de matrice des opérateurs C_{op}^2 et C_{od}^2 sur la base (j K) utilisée.

La signification des termes non diagonaux introduits ici est la même que dans les tableaux précédents, à savoir :

$$\begin{aligned} x_{m_4} &= \sqrt{16 - m^2} \\ x_{m_3} &= \sqrt{9 - m^2} \\ x_{m_2} &= \sqrt{4 - m^2} \end{aligned}$$

REFERENCES

- (1) M. DOUGLAS, N. KROLL - Ann. of Physics, 1974, 82, 89
- (2) J. DALEY, M. DOUGLAS, L. HAMBRO, N. KROLL - Phys. Rev. Lett., 1972, 29, 12
- (3) A. KPDOU, V.W. HUGHES, C.E. JOHNSON, S.A. LEWIS, F.M.J. PICHANICK - Phys. Rev. Lett., 1971, 26, 1613
- (4) F.M.J. PICHANICK, R.D. SWIFT, C.E. JOHNSON, V.W. HUGHES - Phys. Rev., 1968, 169, 55
- (5) D.J. LARSON, P.A. VALBERG, N.F. RAMSEY - Phys. Rev. Lett., 1969, 23, 1369
W.M. HUGHES, H.G. ROBINSON - Phys. Rev. Lett., 1969, 23, 1209
- (6) P.A. VANDEN BOUT, E. AYGÜN, V.J. EHLERS, T. INCESU, A. SAPLAKOGLU, H.A. SHUGART - Phys. Rev., 1968, 165, 88
- (7) S.A. LEWIS, F.M.J. PICHANICK, V.W. HUGHES - Phys. Rev. A, 1970, 2, 86
- (8) M. LEDUC, F. LALOË, J. BROSEL - J. Physique, 1972, 33, 49
- (9) E. AYGÜN, B.D. ZAK, H.A. SHUGART - Phys. Rev. Lett., 1973, 31, 803
- (10) M.A. HEALD, R. BERINGER - Phys. Rev. 1954, 96, 645
H.E. RADFORD, K.M. EVENSON - Phys. Rev. 1968, 168, 70
- (11) R.A.H. HEGSTROM - Phys. Rev. A, 1973, 7, 451
- (12) A. ABRAGAM, J.H. VAN VLECK - Phys. Rev., 1953, 92, 1448
- (13) K. KAMBE, J.H. VAN VLECK - Phys. Rev., 1954, 96, 66
- (14) M. PHILLIPS - Phys. Rev., 1949, 76, 1803
- (15) S.J. BRODSKY, J.R. PRIMACK - Ann. of Phys., 1969, 52, 315
- (16) H. GROTCHE, R.A.H. HEGSTROM - Phys. Rev. A, 1971, 4, 59
- (17) H. GROTCHE, R.A.H. HEGSTROM - Phys. Rev. A, 1973, 8, 2771
- (18) F.E. CLOSE, H. OSBORN - Phys. Rev. D, 1970, 2, 2127
- (19) J.C. WESLEY, A. RICH - Phys. Rev. Lett., 1970, 24, 1320
Phys. Rev. A, 1971, 4, 1341
- (20) T. KINOSHITA, P. CVITANOVIC - Phys. Rev. Lett., 1972, 29, 1534
- (21) H. FESHBACH, F. VILLARS - Rev. Mod. Phys., 1958, 30, 24
- (22) H.A. BETHE, E.E. SALPETER - "Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms", in Handbuch der Physik, volume 35, Springer-Verlag, Berlin - Göttingen - Heidelberg, 1957
- (23) H. OSBORN - Phys. Rev., 1968, 176, 1514
1968, 176, 1523
- (24) R.A. KRAJCIK, L.L. FOLDY - Phys. Rev. Letters, 1970, 24, 545
- (25) S.J. BRODSKY, J.R. PRIMACK - Phys. Rev., 1968, 174, 2071
- (26) C. COHEN-TANNOUJJI - Cours au Collège de France, année 1974 - 1975.

- (27) Z.V. CHRAPLYVY - Phys. Rev., 1953, 91, 388
Phys. Rev., 1953, 92, 310
- (28) W.A. BARKER, F.N. GLOVER - Phys. Rev., 1955, 99, 317
- (29) M. DOUGLAS - Phys. Rev. A, 1972, 6, 1929
- (30) L. HAMBRO - Phys. Rev. A, 1972, 5, 2027
6, 865
7, 479
- (31) L. LANDAU, E. LIFCHITZ - "Théorie des Champs", Editions Mir, Moscou 1966
- (32) S.R. de GROOT, L.G. SUTTORP - "Foundations of Electrodynamics", North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972
- (33) S.R. de GROOT - opus cité, chap. III
- (34) C.G. DARWIN - Phil. Mag., 1920, 39, 537
- (35) R. HAGEDORN - in "Relativistic Kinematics", W.A. Benjamin, 1963, New York - Amsterdam
- (36) V. BARGMAN, L. MICHEL, V.L. TELEGDI - Phys. Rev. Letters, 1959, 2, 435
- (37) E.I. BLOUNT - Phys. Rev., 1962, 128, 2454
- (38) A.O. BARUT - in "Electrodynamics and Classical Theory of Field and Particules", Mac Millan Company, New York (1964)
- (39) C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOË - "Quantum Mechanics", Wiley, London - New York (1976)
- (40) A.P. YUTSIS, I.B. LEVINSON, V.V. VANAGAS - "Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum", published by the Israel Program for Scientific Translations.
- (41) C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOË - "Mécanique quantique", Hermann 1973, tome II, p. 1406
- (42) C. SCHWARTZ - Phys. Rev., 1964, 134, 1181
- (43) B.R. JUDD - in "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy", Mc Graw Hill Book Company, New York (1963)
- (44) F.R. INNES, C.W. UFFORD - Phys. Rev., 1958, 111, 194
- (45) D.M. BRINK, G.R. SATCHLER - "Angular Momentum", Clarendon Press, Oxford, 1968
- (46) S.A. LEWIS, F.M.J. PICHANICK, V.W. HUGHES - Phys. Rev. A, 1970, 2, 86
- (47) M.L. LEWIS - Thèse, Université de Yale, unpublished
M.L. LEWIS, V.W. HUGHES - Phys. Rev. A, 1973, 8, 2845
- (48) C. ECKART - Phys. Rev., 1930, 36, 878
- (49) E.A. HYLLERAAS - Z. Phys., 1928, 48, 469
Z. Phys., 1929, 54, 347
E.A. HYLLERAAS, J. MIDTAL - Phys. Rev., 1956, 103, 829
- (50) M.L. LEWIS, V.W. HUGHES - Phys. Rev. A, 1975, 11, 383

- (51) Y. ACCAD, C.L. PEKERIS, B. SCHIFF - Phys. Rev., 1971, 4, 516
- (52) T.A. MILLER, R.S. FREUND - Phys. Rev. A, 1972, 5, 588
- (53) W.L. WIESE, M.W. SMITH, B.M. GLENNON - in "Atomic Transition Probabilities", N.B.S. Data Series (1966)
- (54) E. AYGÜN, B.D. ZAK, H.A. SHUGART - Phys. Rev. Lett., 1973, 31, 803
- (55) F.D. COLEGROVE, P.A. FRANKEN, R.R. LEWIS, R.H. SANDS - Phys. Rev. Letters, 1959, 3, 420
- (56) V.W. HUGHES - in Proceedings of the Third International Conference on Atomic Physics, 1972, Boulder, Colorado, edited by S. Smith and K.G. Walthers (Plenum Press, New York - London, 1973)
- (57) M.L. LEWIS - in Proceedings of the Fourth International Conference on Atomic Physics, 1974, Heidelberg, Germany, edited by Z. zu Putnitz, E.W. Weber and A. Winnacker (Plenum Press, New York - London, 1975)
- (58) Pour la théorie des signaux obtenus par croisement de niveaux, voir par exemple :
J.P. DESCOUBES - Thèse, Université de Paris, 1967
- (59) C. LHUILLIER, P. RIVIERE, J.P. FAROUX - C.R.A.S., 1973, 276 B, 607
- (60) N. BLOEMBERGEN - in "Frontiers in Physics", 1961 (Benjamin Ed.)
- (61) J.R. ANDERSON, R.M. SANDFORT, D.R. STONE - The Review of Scient. Instr., 1972, 43, 1129
- (62) B.N. TAYLOR, W.H. PARKER, D.N. LANGENBERG - Rev. of Mod. Physics, 1969, 41, 375
- (63) W.C. DICKINSON - Phys. Rev., 1951, 81, 717
N. BLOEMBERGEN, W.C. DICKINSON - Phys. Rev., 1950, 79, 179
- (64) M. CARRÉ - Thèse, Université de Lyon (1975)
- (65) C.C. BOUCHIAT, M.A. BOUCHIAT - Phys. Rev. A, 1970, 2, 1274
C.C. BOUCHIAT, M.A. BOUCHIAT, L.C. POTTIER - Phys. Rev., 1969, 181, 144
- (66) J. LIFSITZ, R.H. SANDS - Bull. Am. Phys. Soc., 1965, 10, 1214
- (67) D.A. LANDMAN - Phys. Rev., 1968, 173, 33
W.R. BENNETT, P.J. KINDLMANN, G.N. MERCER - Applied Opt. Supplement On Chemical Lasers, 1965, 2, 34
K.A. BRIDGETT, T.A. KING - Proc. Phys. Soc., 1967, 92, 75
A.L. OSHEROVICH, Ya.F. VEROLAINEN - Optics and Spectroscopy (USSR), 1968, 24, 81
- (68) J. WIEDER, W.E. LAMB Jr. - Phys. Rev. 1957, 107, 125
- (69) R.D. KAUL - J. Opt. Soc. Am., 1967, 57, 1156
- (70) M. MAUJEAN, J.P. DESCOUBES - C.R.A.S., 1967, 264 B, 1653
- (71) J. VAN ECK - Thèse, Amsterdam, 1964
- (72) P.C. THONEMANN - Nature, 1946, 158, 61
- (73) D. BLANC, A. DEGEILH - J. de Phys. et le Rad., 1961, 22, 230

- [74] C. FERT, N. COLOMBIÉ, B. FAGOT, P.V. CHUONG - Colloque du C.N.R.S. : "le bombardement ionique", 1962 (éd. du C.N.R.S.)
- [75] C.D. MOAK, H. REESE, W.M. GOOD - Nucleonics, 1951, 9, n° 3, p. 18
- [76] A.N. SERBINOV - Pribor. Tekh. Eksper. SSSR, 1958, 3, 39
- [77] H.P. EUBANK, R.A. PECK, R. TRUPELL - The Rev. of Scient. Instr., 1954, 25, 989
- [78] P. RIVIERE - Thèse de 3e cycle, Paris, 1973
- [79] S.K. ALLISON, M. GARCIA-MUNOZ - dans "Atomic and Molecular Processes" (Bates ed.), chap. XIX (1962)
- [80] P.M. STIER, C.F. BARNETT, G.E. EVANS - Phys. Rev., 1954, 96, 973
- [81] A. ABRAGAM - "The Principles of Nuclear Magnetism", Clarendon Press, Oxford, 1961
- [82] B.A. JACOBSON, R.K. WANGSNESS - Phys. Rev., 1948, 73, 942
- [83] D.G. HUGHES, M.R. SMITH - J. of Phys. E, 1971, 4, 13
- [84] J.R. ANDERSON, R.M. SANDFORT, D.R. STONE - The Rev. of Scient. Instr., 1972, 43, 1129
- [85] Y. ROCARD - "Dynamique Générale des Vibrations" Masson, 1949
- [86] M. CARRÉ, J. DESEQUELLES, M. GAILLARD - C.R.A.S., 1971, 273 B, 12
W.O. KAUPPILA, P.J.O. TEUBNER, W.L. FITE, R.J. GIRNIUS - Phys. Rev. A, 1970, 2, 1759
- [87] R.J. VAN BRUNT, R.N. ZARE - The Journ. of Chem. Phys., 1968, 48, 4304
- [88] F. PASCHEN - Ann. der Phys., 1919, 60, 405
1920, 63, 201
- [89] J.B. GREEN, J.A. PEOPLES - Phys. Rev., 1938, 54, 602
1939, 56, 54
- [90] P. JACQUINOT - C.R.A.S., 1936, 202, 1578
- [91] E. GIACOBINO - Thèse, Paris, 1976
- [92] S. LIBERMAN - Physica, 1973, 69, 598
- [93] E. KOENIG - Thèse de 3e cycle, Paris, 1970
- [94] J.C. SLATER - "Quantum Theory of Atomic Structure", Mc Graw Hill Company (1960)
- [95] S. FENEUILLE - J. de Phys., 1967, 28, 61
- [96] G. RACAH - Phys. Rev., 1942, 61, 186
62, 438
- [97] B. DECOMPS - Thèse, Paris, 1969
- [98] C.E. MOORE - "Atomic Energy Levels", N.B.S. publication
- [99] S. LIBERMAN - Thèse, Paris, 1971

- {100} C. BAUCHE - communication personnelle
- {101} P.F. GRUZDEV, A.V. LOGINOV - Optics and Spectroscopy (USSR), 1972, 33, 650
- {102} J.Z. KLOSE - Phys. Rev., 1966, 141, 181
- {103} H. WIEDER, T.G. ECK - Phys. Rev., 1967, 153, 103
- {104} M. GLASS-MAUJEAN, J.P. DESCOUBES - Optics Communic., 1972, 4, 345
- {105} G. GRYNBERG - Thèse, Paris, 1976
- {106} LLOYD ARMSTRONG Jr., S. FENEUILLE - Phys. Rev., 1969, 173, 58
- {107} F. BIRABEN - communication personnelle

