

Annexe F

Pourquoi le terme tensoriel disparaît pour $J = \frac{1}{2}$

Le terme tensoriel du potentiel dipolaire s'exprime formellement comme la composante d'ordre 2 d'une combinaison de produits d'opérateurs angulaires $\{J_i J_j\}$. On peut le voir comme un tenseur sphérique de rang $k = 2$, noté $T^{(2)}$. Deux arguments simples montrent que cette contribution est nulle pour un état à $J = \frac{1}{2}$.

Argument par règles de sélection (Wigner–Eckart). Le théorème de Wigner–Eckart et les règles de couplage angulaire imposent des contraintes sur les éléments de matrice réduits d'un tenseur sphérique $T^{(k)}$. En particulier, pour des états $|J, m\rangle$, l'élément de matrice réduit $\langle J || T^{(k)} || J \rangle$ peut être non nul seulement si la condition triangulaire est satisfaite :

$$|J - J| \leq k \leq J + J \implies 0 \leq k \leq 2J.$$

Autrement dit, le rang k du tenseur ne peut dépasser $2J$. Pour $J = \frac{1}{2}$ on a $2J = 1$: les tenseurs de rang $k \geq 2$ (dont $k = 2$) sont donc interdits — leur élément de matrice réduit s'annule. Par conséquent tous les composants du tenseur d'ordre 2 ont des éléments de matrice nuls entre états de $J = \frac{1}{2}$, et le terme tensoriel ne contribue pas.

Intuition physique. Le terme tensoriel représente une interaction quadrupolaire : il mesure l'anisotropie de la distribution de charge (ou de la densité électronique) de rang 2 (quadrupôle) et la façon dont cette anisotropie couple à la polarisation de la lumière. Un système ayant un moment cinétique minimal $J = \frac{1}{2}$ ne peut porter qu'un dipôle (rang 1) mais pas de quadrupôle indépendant ; il est donc incapable de présenter une réponse tensorielle.

Justification par calcul élémentaire (esquisse). Pour rendre cela plus concret, on peut écrire les produits symétrisés d'opérateurs de spin pour $J = \frac{1}{2}$ en termes des matrices de Pauli σ_i :

$$J_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad J_i J_j = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_i \sigma_j.$$

Or les matrices de Pauli satisfont $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{I} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$, si bien que toute combinaison symétrique et sans trace construite à partir de $\sigma_i \sigma_j$ se réduit à une combinaison de l'identité et d'opérateurs de rang 1 (proportionnels à σ_k). Il n'existe donc pas de composante indépendante de rang 2 dans l'algèbre des opérateurs sur l'espace à deux dimensions. En particulier, la combinaison traceless/ quadrupolaire

$$3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2$$

s'annule (ou se réduit à une combinaison triviale proportionnelle à l'identité) lorsqu'elle est restreinte à l'espace $J = \frac{1}{2}$. Ceci confirme algébriquement l'argument angulaire précédent.

Remarque sur la forme normale de la fraction. La formule souvent écrite

$$\frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J - 1)}$$

est valable pour $J \geq 1$. Pour $J = \frac{1}{2}$ le dénominateur $2J(2J - 1)$ s'annule formellement; ceci indique simplement que l'écriture fractionnaire n'est pas définie là où le terme tensoriel n'a pas de sens physique. Le bon énoncé est : « pour $J < 1$ (en particulier $J = \frac{1}{2}$), la composante tensorielle est identiquement nulle ».

Conclusion. Pour les atomes alcalins dans leur état fondamental (configuration $nS_{1/2}$, donc $J = \frac{1}{2}$), la contribution tensorielle du potentiel dipolaire est strictement nulle. On conserve alors uniquement les termes scalaire et, éventuellement, vectoriel (ce dernier ne dépendant que de la polarisation elliptique/circulaire).