

**PHYSIQUE ATOMIQUE**  
**TD 2**  
**STRUCTURE FINE ET HYPERFINE – APPLICATION A L'ATOME**  
**D'HYDROGENE**

Le problème se propose d'étudier les structures fine et hyperfine dans les atomes, avec une application à l'atome d'hydrogène. Ce dernier est constitué d'un électron ( $-e$ ) et d'un proton ( $+e$ ), ce dernier étant supposé infiniment lourd par rapport à l'électron qui gravite autour. Dans une première partie, il s'agira d'établir le hamiltonien du système – partie non perturbée  $H_0$  et termes correctifs fins et hyperfins- dans le régime faiblement relativiste. En effet, sur l'orbite la plus basse  $n = 1$ , la vitesse  $v$  de l'électron – situé à la distance  $a_0 = 0.5 \text{ \AA}$  du noyau- est telle que  $v/c = \alpha = e^2 / \hbar c \approx 1 / 137$ , avec  $\alpha$  la constante de structure fine. Dans une seconde partie, il s'agira d'appliquer les résultats obtenus à la structure fine du niveau  $n = 2$  et à la structure hyperfine du niveau  $n = 1$ .

**Etablissement du hamiltonien en régime faiblement relativiste**

On rappelle que, de manière générale, un hamiltonien est constitué d'un terme d'énergie cinétique et d'un terme d'énergie potentielle. La conservation du quadrivecteur impulsion - énergie en relativité restreinte permet d'exprimer l'énergie totale  $E$  d'une particule relativiste par la relation  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ , avec  $p$  le module de l'impulsion et  $m$  la masse au repos de la particule.

1. A l'aide de cette relation appliquée à l'électron de l'atome d'hydrogène, donner l'expression du hamiltonien du système en effectuant un développement limité à l'ordre 2 de l'énergie totale  $E$  de l'électron en puissance de  $|\vec{p}|/m_e c$ . On distinguera l'énergie au repos de l'électron  $m_e c^2$ , du hamiltonien non relativiste – et non perturbé-  $H_0 = p^2/2m_e + U(r)$  (avec  $U(r)$  l'énergie potentielle électrostatique de l'électron dans le champ du proton) et du terme correctif en  $p^4$  que l'on explicitera ( $W_{mv}$ ) et dont on donnera également la signification physique. Evaluer le rapport  $W_{mv}/H_0$ , le comparer à  $\alpha$  et conclure.
2. Cette question a pour but d'introduire, dans le hamiltonien, le terme  $W_{SO}$  dû au couplage spin – orbite. L'électron se déplace à la vitesse  $\vec{v} = \vec{p}/m_e$  dans le champ électrostatique  $\vec{E}$  créé par le proton. La relativité restreinte indique qu'il apparaît, dans le référentiel propre de l'électron, un champ magnétique  $\vec{B} = -1/c^2 \vec{v} \wedge \vec{E}$  (au premier ordre en  $v/c$ ). De fait, comme l'électron possède un moment magnétique propre de spin  $\vec{M}_s$  proportionnel à son spin  $\vec{S}$ , selon  $\vec{M}_s = g_e \mu_B \vec{S}/\hbar = -e/m_e \vec{S}$  ( $g_e$  est le facteur de spin de l'électron et  $\mu_B$  le magnéton de Bohr électronique), il faut alors tenir compte d'un terme d'énergie d'interaction  $W = -\vec{M}_s \cdot \vec{B}$ . Exprimer  $\vec{E}$  en fonction de  $e$  et  $dU(r)/dr$ . En déduire  $\vec{B}$  en fonction de  $e, c, m_e, r, dU(r)/dr, \vec{p}$  et  $\vec{r}$ . Un moment cinétique  $\vec{L}$  étant défini par  $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ , exprimer finalement  $W$  en fonction de  $e, c, m_e, r, \vec{L}$  et  $\vec{S}$ . L'énergie d'interaction  $W$  ainsi calculée, est à un facteur  $1/2$  près, le terme de couplage spin – orbite  $W_{SO}$ . Ce facteur provient du fait que le mouvement de l'électron autour du proton n'est ni rectiligne ni uniforme. En remarquant que  $|\vec{L}|$  et  $|\vec{S}|$  sont de l'ordre de  $\hbar$ , évaluer le rapport  $W_{SO}/H_0$ . Dans la suite du problème, on posera le pré-facteur  $\xi(r) = e^2/2m_e^2 c^2 1/r^3$  devant le produit  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ .

On pourrait montrer qu'un autre terme correctif, dit de Darwin, et du même ordre de grandeur que  $W_{SO}$  apparaît dans le hamiltonien. Il vaut  $W_D = \hbar^2/8m_e^2c^2 \Delta U(r)$ , et est dû à la non-localité de l'interaction entre l'électron et le champ coulombien du proton. Dans la suite du problème, on appellera la correction de structure fine  $W_f = W_{mv} + W_{SO} + W_D$ .

3. Cette question a pour but de compléter le hamiltonien, avec le terme  $W_{hf}$  dû à la structure hyperfine. Le proton, tout comme l'électron, est une particule de spin  $1/2$ . Ce spin  $\vec{I}$  est lié au moment magnétique  $\vec{M}_I$  par la relation  $\vec{M}_I = g_p \mu_N \vec{I}/\hbar$ , avec  $g_p \approx 5,585$  le facteur de spin du proton et  $\mu_N = e\hbar/2M_p$  le magnéton de Bohr nucléaire.  $M_p$  représente la masse du proton. Calculer le rapport  $\mu_N/\mu_B$  et comparer ainsi le magnétisme d'origine nucléaire à celui d'origine électronique.

L'électron se déplace non seulement dans le champ électrostatique  $\vec{E}$  du proton, mais également dans le champ magnétique créé par  $\vec{M}_I$ . Il résulte qu'il faut rajouter au hamiltonien précédemment établi les termes supplémentaires suivants :

$$W_{hf} = -\mu_0/4\pi \left\{ -e/m_e r^3 \vec{L} \cdot \vec{M}_I + 1/r^3 \left[ 3(\vec{M}_S \cdot \vec{n})(\vec{M}_I \cdot \vec{n}) - \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \right] + 8\pi/3 \vec{M}_S \cdot \vec{M}_I \delta(r) \right\}$$

avec  $\mu_0$  la perméabilité du vide,  $\vec{n}$  le vecteur unitaire de la droite qui joint le proton et l'électron, et  $\delta$  la fonction de Dirac. Le premier terme représente l'interaction du moment  $\vec{M}_I$  avec le champ moyen créé au niveau du proton par la rotation de la charge électronique. Le deuxième terme représente l'interaction dipôle – dipôle entre les moments magnétiques électronique et nucléaire. Le dernier terme est appelé « terme de contact » de Fermi, et provient de la singularité en  $r = 0$  du champ créé par le moment magnétique du proton. Du terme  $W_{hf}$ , évaluer l'ordre de grandeur du rapport  $W_{hf}/W_{SO}$ .

### Application aux structures fine du niveau $n = 2$ et hyperfine du niveau $n = 1$ de l'atome d'hydrogène

#### STRUCTURE FINE

1. Rappeler l'énergie totale de l'atome d'hydrogène associée au niveau  $n = 2$ .
2. Donner la base orthonormée qui correspond à ce même niveau,
  - a. ne tenant pas compte du spin,
  - b. tenant compte du spin.
3. Donner la dégénérescence totale dans ce dernier cas.

Pour le cas  $n = 2$ , on peut montrer que :

- la correction de structure fine  $W_f$  n'agit pas sur le spin du proton
- cette même correction ne connecte pas les sous-couche  $2s$  et  $2p$ .

4. Calculer les éléments de matrice  $\langle W_{mv} \rangle_{2s}$  et  $\langle W_{mv} \rangle_{2p}$  en fonction de  $\alpha$ ,  $m_e$  et  $c$ .

On donne  $\langle W_{mv} \rangle_{n,l} = -1/2m_e c^2 \left[ (E_n)^2 + 2E_n e^2 \langle 1/r \rangle_{n,l} + e^4 \langle 1/r^2 \rangle_{n,l} \right]$ , ainsi que les moyennes  $\langle 1/r \rangle_{2s} = 1/4a_0$ ,  $\langle 1/r^2 \rangle_{2s} = 1/4a_0^2$ ,  $\langle 1/r \rangle_{2p} = 1/4a_0$  et  $\langle 1/r^2 \rangle_{2p} = 1/12a_0^2$ .

5. Calculer les éléments de matrice  $\langle W_{SO} \rangle_{2s}$  et  $\langle W_{SO} \rangle_{2p}$  en fonction des mêmes paramètres  $\alpha$ ,  $m_e$  et  $c$ .

On donne le pré-facteur  $\xi_{2p} = 1/48\hbar^2 m_e c^2 \alpha^4$ .

- Calculer les éléments de matrice  $\langle W_D \rangle_{2s}$  et  $\langle W_D \rangle_{2p}$  en fonction des mêmes paramètres.

On donne  $\langle W_D \rangle_{n,l,m} = \hbar^2/8m_e^2 c^2 4\pi e^2 |R_{n,l}(0)Y_l^m|^2$ , avec les fonctions radiales  $R_{n,l}(r)$  des états 2s,  $R_{2,0}(r) = 2(2a_0)^{-3/2}(1-r/2a_0)\exp(-r/2a_0)$  et 2p,  $R_{2,1}(r) = 3^{-1/2}(2a_0)^{-3/2} r/a_0 \exp(-r/2a_0)$ . L'orbitale sphérique  $Y_0^0$  vaut –quant à elle-  $1/\sqrt{4\pi}$ .

- Tracer le diagramme de structure fine de l'atome d'hydrogène pour l'état  $n = 2$ .

### STRUCTURE HYPERFINE

- Donner la base orthonormée qui correspond au niveau  $n = 1$  tenant compte du spin, et donner la dégénérescence totale dans ce dernier cas.
- Montrer que la correction de structure fine  $W_f$  ne lève pas la dégénérescence du niveau 1s.
- Montrer que les deux premiers termes de correction de structure hyperfine, celui d'interaction de  $\vec{M}_I$  avec le champ moyen créé par rotation de la charge électronique et celui d'interaction dipôle – dipôle entre moments magnétiques, sont nuls.
- Calculer le troisième et dernier terme, celui « de contact ». Montrer qu'il peut se mettre sous la forme  $A \vec{I} \cdot \vec{S}$ , avec  $A = 4/3 g_p m_e/M_p m_e c^2 \alpha^4 (1 + m_e/M_p)^{-3} 1/\hbar^2$ .  
On rappelle la fonction radiale  $R_{1,0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} \exp(-r/a_0)$ .
- Tracer le diagramme de structure hyperfine pour l'état  $n = 1$ .