0A5

# STRUCTURE HYPERFINE DE L'ÉTAT 1*s*2*p* <sup>3</sup>*P* DE L'ATOME D'HÉLIUM

### Amirouche TOUAT, Messaoud NEMOUCHI et Abdelouahab TALEB

Laboratoire d'Électronique Quantique, Faculté de Physique, U.S.T.H.B, B.P. 32, El Alia, Bab Ezzouar, Alger E-mail : touatamirouche@hotmail.com

**RÉSUMÉ :** La structure fine des niveaux atomiques est le résultat des effets relativistes dans les atomes. La structure hyperfine est une structure au sein même des structures fines. Elle est le résultat de l'interaction entre les champs électromagnétiques nucléaire et électronique. Dans ce travail, nous avons calculé les structures hyperfines des états (1s2p) 3P0,1,2. Les paramètres hyperfins de cet état ont été évalués à partir de fonctions d'onde obtenues suivant l'approche multiconfigurationnelle Hartree-Fock. Nous avons tenu compte par le biais de l'hamiltonien de Breit-Pauli et hyperfin des effets des non-diagonaux couplant les fonctions d'état de configuration. Ces effets se sont avérés cruciaux dans l'interprétation des structures hyperfines de l'état (1s2p)<sup>3</sup>P. Nos résultats sont en bon accord avec l'expérience et d'autres calculs théoriques basés sur des approches différentes.

MOTS-CLÉS : structure hyperfine, Breit-Pauli, MCHF, couplage hyperfin non diagonal

#### 1. Introduction

Depuis l'avènement de la mécanique quantique, l'atome d'hélium a constitué le prototype des problèmes à trois corps pour tester les différentes méthodes d'approximation [1]. Aujourd'hui, la théorie de la structure atomique de l'hélium et les mesures expérimentales de ses propriétés ont atteint des précisions qui rivalisent avec les systèmes mono-électroniques, comme l'hydrogène et l'ion He+. Sur le plan théorique, il est possible de trouver des solutions quasi exactes à l'équation de Schrödinger, non seulement pour l'état fondamental mais aussi pour l'ensemble des états simplement excités [2].

Parmi les isotopes de l'hélium, seul l'<sup>3</sup>He possède un moment cinétique nucléaire non nul. Cela signifie que ces niveaux J possèdent une structure hyperfine. Il est donc important de mesurer et de calculer précisément ces structures au sein de cet isotope léger, électriquement neutre, afin de mieux comprendre les spectres des autres éléments héliumoïdes.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés au calcul de la structure hyperfine de l'état (1s2p) <sup>3</sup>P et cela en tenant compte du couplage hyperfin non diagonal entre niveaux J. Les paramètres hyperfins de cet état ont été évalués à partir de fonctions d'onde obtenues suivant l'approche multiconfigurationnelle Hartree-Fock.

Dans cet article nous présentons dans le premier paragraphe les méthodes de calcul des fonctions d'onde électronique. Dans le deuxième paragraphe nous décrivons la théorie de la structure hyperfine. Enfin, le dernier paragraphe est consacré aux résultats que nous avons obtenus.

### 2- Calculs des fonctions d'onde poly-électronique

### 2.1. Interaction de configurations

La théorie des perturbations montre que le calcul des fonctions d'onde d'ordre zéro et d'ordre un requiert l'utilisation de superposition de configurations. En effet, ces deux fonctions d'onde sont des combinaisons linéaires de CSF, appartenant au complexe de Layzer<sup>(1)</sup> s'agissant de la première et en dehors du complexe de Layzer pour ce qui est de la deuxième.

Dans la méthode d'interaction de configurations la fonction d'onde totale  $\Psi(\mathcal{L}S)$ , appelée fonction d'état atomique (ASF), est décrite par une combinaison linéaire de CSF " $\psi(\mathcal{L}S)$ ", formant un ensemble de fonctions orthonormées linéairement indépendantes :

$$\Psi(\mathcal{MS}) = \sum_{i}^{M} c_{i} \psi(\mathcal{MS}) \text{ avec } \sum c_{i}^{2} = 1$$
 (1)

où M représente le nombre de configurations.

Si les fonctions d'onde radiales  $\{P_{n_i l_i}\}$  qui interviennent dans les CSF  $\psi(\mu S)$  sont connues, seuls les coefficients  $\{c_i\}$  sont à déterminer. Ces derniers peuvent être déduits en appliquant le principe variationnel à la fonctionnelle d'énergie en imposant sa stationnarité par rapport à la variation de chaque coefficients  $\{c_i\}$ , tout en respectant la condition de normalisation de la fonction  $\Psi(\mu S)$ . Nous sommes alors conduits à résoudre le système séculaire :

$$(H - ES)C = 0 \tag{2}$$

où les matrices H et S sont formées, respectivement, des éléments :

$$H_{ij} = \left\langle \psi(\gamma_i) LS \middle| H \middle| \psi(\gamma_j) LS \right\rangle$$
$$S_{ij} = \left\langle \psi(\gamma_i) LS \middle| \psi(\gamma_j) LS \right\rangle$$

La matrice C est composée des M vecteurs orthonormés  $(c_1, c_2, ..., c_M)^t$ , alors que E est une matrice diagonale dont les éléments sont les M valeurs des énergies correspondant aux M fonctions propres issues du calcul.

#### 2.2. Méthode multiconfigurationnelle Hartree-Fock

Dans l'approximation multiconfigurationnelle Hartree-Fock (MCHF) la fonction d'onde  $\Psi(\gamma LS)$  d'un état atomique caractérisé par la configuration  $\gamma$  et le terme LS est une combinaison linéaire des fonctions d'état de configuration (CSF) :

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^{NCSF} c_i \psi_i(\gamma_i LS)$$
(3)

Chaque CSF  $\psi_i(\gamma_i LS)$  est une fonction propre des opérateurs moments cinétiques L<sup>2</sup>, S<sup>2</sup>, L<sub>Z</sub> et S<sub>Z</sub>. Ce sont des sommes antisymétriques de produits de spin-orbitales obtenues par les techniques de couplages des moments angulaires électroniques qui consistent à appliquer le modèle vectoriel à la configuration électronique. Les fonctions spin-orbitales sont des fonctions mono-électroniques dont la forme est :

$$\varphi_{nlm_lm_s} = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{ml}^l(\theta, \phi) \chi_{\sigma m_s}$$
(4)

où les fonctions radiales  $P_{nl}(r)$  sont solutions des équations Hartree-Fock [3].  $Y_{m_l}^l$  et  $\chi_{\sigma m_s}$  sont respectivement les harmoniques sphériques et les fonctions de spin.

La méthode MCHF est une méthode variationnelle qui consiste à optimiser simultanément l'énergie totale par rapport aux distributions radiales  $P_{nili}(r)$  et aux coefficients  $c_i$ .

(1) Le complexe de Layzer est l'ensemble de configurations caractérisées par la même énergie  $E_0 \sum_i \frac{1}{n_i^2}$  à l'ordre zéro, dans l'approximation hydrogénoïde.

L'énergie correspondante est donnée par :

$$E(\gamma LS) = \langle \Psi(\gamma LS) | H | \Psi(\gamma LS) \rangle$$
  
=  $\sum_{st} c_s c_t \langle \psi(\gamma_s LS) | H | \psi(\gamma_t LS) \rangle$   
=  $\sum_{st} c_s c_t H_{st}$  (5)

où *H* est l'hamiltonien non relativiste :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left( -\frac{1}{2} \nabla_{i}^{2} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}$$
(6)

L'élément de matrice  $H_{ij}$  est non nul si les deux fonctions d'état de configuration diffèrent au plus de deux orbitales. En outre les deux fonctions d'état de configuration doivent avoir la même parité et les mêmes moments angulaires électroniques L et de spin S. La matrice d'interaction peut être représentée, comme dans l'approximation Hartree-Fock (HF), par une somme d'intégrales généralisées de Slater et d'intégrales mono-électroniques pondérées par des coefficients provenant de l'intégrale angulaire. Il est alors possible de construire une fonctionnelle  $W(\gamma LS)$  analogue à celle utilisée dans l'approche mono-configurationnelle ; si l'on exige la stationnarité de cette fonctionnelle pour toute variation des orbitales  $P_{nili}(r)$  on obtient les équations multiconfigurationnelles Hartree-Fock :

$$\left\{\frac{d^{2}}{dr^{2}} + \frac{2}{r}\left\{Z - Y(nl;r)\right\} - \mathcal{E}_{nl,nl} - \frac{l(l+1)}{r^{2}}\right\} P_{nl}(r) = \frac{2}{r}\left(X(nl;r) + I_{nl}(r)\right) + \sum_{n'\neq n} \mathcal{E}_{nl,n'l} P_{n'l}(r) \quad (7)$$

où  $\frac{2}{r}Y(nl;r)$  et  $\frac{2}{r}X(nl;r)$  sont respectivement les potentiels direct et d'échange.

Notons que les équations MCHF et les équations aux valeurs propres sont couplées. Ainsi les fonctions radiales dépendent des coefficients de mélange ci et vice versa. Etant donné l'existence de ce couplage entre l'équation aux valeurs propres et le problème du champ autocohérent, la résolution des équations MCHF ne peut se faire que par une procédure itérative, chaque cycle étant composé de deux étapes :

- Résoudre le problème séculaire pour obtenir les coefficients.
- Résoudre les équations radiales MCHF pour déterminer les fonctions radiales  $P_{nili}(r)$ .

Ces deux étapes sont répétées jusqu'à la convergence de l'énergie totale, des vecteurs propres et des distributions radiales.

#### 3. Théorie de l'interaction hyperfine

La structure hyperfine des niveaux d'énergie atomique est due principalement à l'interaction entre le champ magnétique produit par les électrons au sein du noyau et le moment dipolaire magnétique, et à l'interaction entre le gradient du champ électrique des électrons et le moment quadrupolaire nucléaire. Sa contribution dans l'hamiltonien total s'écrit comme suit:

$$H_{hfs} = T^{(1)} \cdot M^{(1)} + T^{(2)} \cdot M^{(2)}$$
(8)

Où T et M sont des opérateurs tensoriels qui agissent respectivement dans les espaces des fonctions d'onde électroniques  $|vJM_{J}\rangle$  et  $|vIM_{I}\rangle$  nucléaires.

Les expressions des deux opérateurs sont :

$$T^{(1)} \cdot M^{(1)} = \frac{\alpha^2}{4} \frac{m_e}{M_p} g_I I \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{2l_i^{(1)}}{r_i^3} \frac{g_s \sqrt{10}}{r^3} \left[ C^{(2)} \otimes s^{(1)} \right]^{(1)} + g_s \frac{2}{3} \frac{\delta(r_i)}{r_i^2} s_i^{(1)} \right]$$
(9)

$$T^{(2)} \cdot M^{(2)} = -\sum_{i=1}^{Z} \sum_{j=1}^{N} \frac{r_{p_i}^2}{r_{e_j}^3} C^{(2)}(e_j) \cdot C^{(2)}(p_i)$$
(10)

Les éléments de matrice de l'opérateur hyperfin, dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique, sont définis par :

$$E_{M_{1}}(JIF, J'IF) = (-1)^{F+I+J'} \frac{\mu_{I}}{I} \sqrt{I(I+1)(2I+1)} \begin{cases} F & I \\ 1 & J' \\ I \end{cases} \langle \delta J \| T^{(1)} \| \delta J' \rangle$$
(11)

$$E_{E_{2}}(JIF, J'IF) = (-1)^{F+I+J'} \frac{Q}{2} \sqrt{\frac{(I+1)(2I+1)(2I+3)}{I(2I-1)}} \begin{cases} F & I \\ 2 & J' \\ I \end{cases} \left\langle \delta J \right\| T^{(2)} \left\| \delta J' \right\rangle$$
(12)

La présence des deux symboles 6j dans les expressions de  $E_{M_1}$  et  $E_{E_2}$  impose des règles de sélections sur J et J' qui sont, en supposant  $J' \leq J$ , les suivantes :

$$J' = J, J - 1 \quad \text{pour } E_{M_1}$$
$$J' = J, J - 1, J - 2 \quad \text{pour } E_{E_2}$$

Les éléments de matrice de l'interaction hyperfine, dans la base des états couplés  $|JIFM_F\rangle$ , s'expriment, souvent, en fonction des constantes hyperfines dipolaire magnétique A et quadrupolaire électrique B, diagonaux (J = J') et non-diagonaux (J  $\neq$  J') :

$$A_{J} = \frac{\mu_{I}}{I} \frac{1}{\left[J(J+1)(2J+1)\right]^{\frac{1}{2}}} \left\langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J \right\rangle$$
(13)

$$A_{J,J-1} = \frac{\mu_I}{I} \frac{1}{\left[J(2J-1)(2J+1)\right]^{\frac{1}{2}}} \left\langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J, J-1 \right\rangle$$
(14)

$$B_{J} = 2Q \left[ \frac{J(2J-1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \left\langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J \right\rangle$$
(15)

$$B_{J,J-1} = \frac{Q}{2} \left[ \frac{J(J-1)}{(2J-1)(J+1)(2J+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left\langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J, J-1 \right\rangle$$
(16)

$$B_{J,J-2} = \frac{Q}{4} \left[ \frac{J(J-1)(2J-1)}{(2J-3)(2J+1)} \right]^{1/2} \left\langle \gamma J \| T^{(1)} \| \gamma J, J-2 \right\rangle$$
(17)

En fonction des constantes hyperfines A et B, les éléments matriciels qui expriment les corrections énergétiques liées à l'interaction dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique s'écrivent [4] :

$$E_{M_1}(j,j) = \frac{1}{2} A_J C$$
(18)

$$E_{M_1}(j,j-1) = \frac{1}{2} A_{J,J-1} \sqrt{(s+1)(s-2I)(s-2F)(s-2J+1)}$$
(19)

$$E_{E_2}(j,j) = B_J \frac{\frac{3}{4}C(C+1) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)}$$
(20)

$$E_{E_2}(j,j-1) = -B_{J,J-1} \frac{(C+J+1)\sqrt{3(s+1)(s-2F)(s-2I)(s-2J+1)}}{2I(2I-1)J(J-1)(2J-1)}$$
(21)

$$E_{E_2}(j, j-2) = -B_{J,J-2} \left[ 6s(s+1)(s-2F-1)(s-2I-1) \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{(s-2F)(s-2I)(s-2J+1)(s-2J+2)}}{2I(2I-1)J(J-1)(2J-1)}$$
(22)

avec

$$C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$$
 et  $s = I + J + F$ 

Dans les atomes légers, où les effets relativistes peuvent être négligés, les constantes A et B, diagonales et non-diagonales, peuvent être exprimées en fonction de paramètres hyperfins  $a_1$ ,  $a_{sd}$ ,  $a_c$  et  $b_q$  [5], indépendants de J :

$$a_{l} = \left\langle \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \middle| \sum_{I=1}^{N} l_{0}^{(1)}(i)r_{i}^{-3} \middle| \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \right\rangle$$

$$a_{sd} = \left\langle \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \middle| \sum_{I=1}^{N} 2C_{0}^{(2)}(i)s_{0}^{(1)}(i)r_{i}^{-3} \middle| \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \right\rangle$$

$$a_{c} = \left\langle \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \middle| \sum_{I=1}^{N} 2s_{0}^{(1)}(i)r_{i}^{-2}\delta(r_{i}) \middle| \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \right\rangle$$

$$b_{q} = \left\langle \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \middle| \sum_{I=1}^{N} 2C_{0}^{(2)}(i)r_{i}^{-3} \middle| \mathcal{Y}_{L}SM_{L}M_{S} \right\rangle$$

où  $M_L = L$  et  $M_S = S$ . Ils sont connus sous le nom de paramètres orbitalaire (a<sub>1</sub>), spindipolaire (a<sub>sd</sub>), de contact (a<sub>c</sub>) alors que b<sub>q</sub> est le gradient du champ électrique à l'intérieur du noyau.

Le moment quadrupolaire nucléaire de l'atome <sup>3</sup>He est nul car son moment cinétique nucléaire vaut 1/2. La structure hyperfine de ses niveaux d'énergie est donc due uniquement à l'interaction dipolaire magnétique. D'autre part son moment dipolaire magnétique nucléaire vaut  $\mu_I = -2.12749772$  n.m [6].

### 4. Résultats et Discussion

### 4-1. Paramètres hyperfin de l'état (1s2p) <sup>3</sup>P

Les paramètres hyperfins électroniques dont les expressions sont données dans le paragraphe précédent, ont été calculés pour l'état  $(1s2p)^{3}P$ .

Ensemble actif	al	a <sub>sd</sub>	a <sub>c</sub>
HF	0.06523	-0.01305	31.71215
3	0.06902	-0.01456	31.64418
4	0.06923	-0.01380	31.63968
5	0.06931	-0.01410	31.63893
6	0.06931	-0.01399	31.63873
7	0.06932	-0.01404	31.63867
8	0.06932	-0.01402	31.63864
9	0.06932	-0.01403	31.63867
10	0.06932	-0.01402	31.63703
B.C.GOU and al [7]	0.06933	-0.01402	31.62570

Tableau1 : Paramètres hyperfins électroniques (en u.a.) de l'état (1s2p 3P) de 3He

Les trois paramètres sont non nuls. Mais la contribution du paramètre de contact est de loin la plus importante. Nous prenons comme valeurs finales des trois paramètres hyperfins  $a_l$ ,  $a_{sd}$  et  $a_c$  de cet état, respectivement, 0.06932, -0.01402 et 31.63703 en u.a. Comme nous pouvons le constater, nos valeurs sont en très bon accord avec celles de Gou et al [7]. Ces derniers ont utilisé une méthode variationnelle où les fonctions de base sont des orbitales de Slater.

# 4.2. Constantes hyperfines de l'état (1s2p) <sup>3</sup>P<sub>0,1,2</sub>

L'état (1s2p)  ${}^{3}P_{0}$  ne possède pas de structure hyperfine car son moment cinétique électronique total est nul (J = 0). Les constantes hyperfines diagonales et non-diagonales des états (1s2p)  ${}^{3}P_{1,2}$  sont données dans le tableau 2. Elles correspondent à l'espace actif n = 10.

Dans la dernière colonne de la même table nous donnons les valeurs des constantes diagonales calculées par les auteurs Gou et al. Ces derniers ne présentent aucun résultat des éléments non diagonaux dans leur article. Toutefois l'accord sur les constantes calculées est excellent.

					(**************************************	
J	J	Aorb	A <sub>sd</sub>	Acont	Α	A [7]
0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	
1	1	-14.07	-14.25	-2143.11	-2171.43	-2170.43
2	2	-14.07	2.85	-2143.11	-2754.33	-2153.69
0	1	-22.98	-11.63	3499.68	3465.07	
0	2	0.0	0.0	0.0	0.0	
1	2	-8.12	3.29	1232.49	1232.49	

Tableau2 : Constantes hyperfines diagonales et non-diagonales A<sub>J,J'</sub> (en MHz) de <sup>3</sup>He(1s2p <sup>3</sup>P).

## 4.3. Structure hyperfine :

A partir des constantes hyperfines nous pouvons maintenant déterminer les structures hyperfines des différents états J, c'est à dire les écarts d'énergie entre les niveaux hyperfins.

Les niveaux  $(1s2p)^{3}P_{1}$  et  $(1s2p)^{3}P_{2}$  possèdent chacun deux niveaux hyperfins caractérisés respectivement par (F =1/2,3/2) et (F =3/2,5/2). Nous avons calculé d'abord leurs structures hyperfines à l'aide des constantes hyperfines diagonales. Les résultats sont donnés dans la table 3. Comme on le voit, le désaccord avec l'expérience [8] est total.

Dans la même table, nous reprenons les mêmes écarts hyperfins calculés cette fois-ci en tenant compte de l'effet du couplage hyperfin non-diagonal entre les différents niveaux de structure fine (au-delà de l'approximation de premier ordre en énergie). Les énergies des niveaux hyperfins sont calculées à partir des constantes hyperfines, en construisant la matrice associée à l'opérateur hyperfin, incluant les éléments non-diagonaux en J pour la même valeur de F , puis en procédant à sa diagonalisation [9], [10]. De la figure 2, on peut voir qu'il se manifeste un couplage hyperfin non-diagonal entre les deux niveaux de structure fine J = 0, et J = 1 pour F =1/2, entre J = 1 et J = 2 pour F =3/2, alors que l'état hyperfin F =5/2 reste pur en J. Les résultats obtenus sont en très bon accord avec l'expérience et autre théorie.

J	$\Delta E_{F-1,F}$							
		Sans couplage	Avec couplage	Experience [8]	Autre théorie [11]			
1	$\Delta E_{1/2,3/2}$	3257.31	4512.82	4512.213(3)	4512.191			
2	$\Delta E_{3/2,5/2}$	5386.10	6965.92	6961.099(3)	6961.104			

Tableau3 : structure hyperfin de l'état 1s2p <sup>3</sup>P de <sup>3</sup>He

### **5-** Conclusion

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'une des propriétés atomiques fondamentales de l'hélium qui est la structure hyperfine de l'état  $(1s2p)^{3}P$ .

Le calcul des structures hyperfines de cet état est a été fait à l'aide de fonctions d'onde obtenues par l'approche multiconfigurationnelle Hartree-Fock.

Dans cette étude, le résultat le plus important est la mise en évidence d'un couplage hyperfin non diagonal entre les niveaux J de l'état (1s2p)<sup>3</sup>P. A notre connaissance c'est la première fois que la structure hyperfine de cet état est calculée par cette approche, en tenant compte de ce couplage. Le résultat que nous avons obtenu est remarquable quand on le compare à l'expérience et autre théorie.



Figure1 : Diagramme des niveaux hyperfins des états (1s2p)<sup>3</sup>P. -a : sans couplage hyperfin non-diagonal, -b :avec couplage, -c : expérimental [51]

#### Références

- [1] H.A.Bethe and E.E.Salpeter. Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atoms. Springer Verlag, Berlin and New York (1957).
- [2] G.W.F. Drake, editor. Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook. American Institute of Physics, Woodbury, New York (2006).
- [3] C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jönsson. Computational Atomic Structure An MCHF Approach. Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997.
- [4] C. Froese Fischer, G. Gaigalas, and M. Godefroid. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 30 :3333–3342, (1997).
- [5] A. Hibbert. Rep. Prog. Phys., 38 :1217-1338, (1975).
- [6] N.J. Stone. Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments. At. Data Nucl. Data Tables, 90 :75, (2005).
- [7] B.C. Gou, F. Wang, and X.L. Wu. Fine structure and hyperfine structure of some excited states of helium. Eur. Phys. J. D, 27 :27, (2003).
- [8] J. D. Prestage, E. A. Hinds, and F. M. J. Pichanick. Precise measurements of hyperfine structure in the 2p3 state of <sup>3</sup>He. Phys. Rev. Let., 50 :828, (1983).
- [9] P. Jönsson, C.-G. Wahlström, and C. Froese Fischer. Comput. Phys. Commun., 74 :399–414, (1993).

[10] C. Blondel, C. Delsart, C. Valli, S. Yiou, M.R. Godefroid, and S. Van Eck. Phys. Rev. A, 64 :052504/1–14, (2001).

[11] Q.Wu and G.F.W Drake. J. Phys. B: At. Mol. Phy. 40, 393(2007).