

MATRICES DE TRANSFORMATION ENTRE LES COUPLAGES LS ET jj : APPLICATION AUX ETATS DE L'He I

El-Habib GUEDDA

*Institut des Sciences et Technologie-Laboratoire VTRS,
Centre Universitaire El-Oued, B.P. 789 El-Oued 39000, ALGERIE*

E-mail : elh_guedda@yahoo.fr

ملخص :

يتعلق استعمال الازدواجين LS و jj في حساب البنى الذرية بالجمل الذرية تحت الدراسة. يبدأ أن التعرف عن وسيلة للانتقال ما بين الازدواجين يعتبر أمرا هاما عند شروط خاصة. نقدم في هذا العمل مصفوفات الانتقال ما بين الازدواجين ونقوم بتطبيقات على حالات الهيليوم.

كلمات دالة : الازدواج LS , الازدواج jj , مصفوفة الانتقال , البنية الذرية , حالات الهيليوم.

RÉSUMÉ :

L'utilisation du couplage LS ou du couplage jj dans le calcul des structures atomiques dépend des systèmes atomiques à étudier. Cependant il est très utile de disposer d'un moyen de passage entre les deux couplages pour des conditions bien spécifiées. Nous présentons dans ce travail les matrices de passage entre ces deux couplages et nous faisons l'application aux états de l'hélium.

MOTS-CLÉS : Couplage LS, couplage jj, matrice de transformation, structure atomique, états de l'hélium.

ABSTRACT:

The use of both LS and jj coupling in the calculation of atomic structures depends on the studied atomic systems. However it is useful to have an algebraic transformation between the two couplings mode for many specified conditions. We present in this work the transition matrix between these couplings with application to helium states.

KEYWORDS: LS coupling, jj coupling, transition matrix, atomic structure, helium states.

1. Introduction

Actuellement, et dépendant de leurs rôles, les deux approches non relativiste ou relativiste sont utilisées pour l'étude de structure et propriétés des atomes et des ions à plusieurs électrons incluant aussi les atomes neutres lourds et les atomes fortement ionisés. L'approche non relativiste est basée sur le couplage LS alors que dans le cas relativiste, la théorie implique l'utilisation du couplage jj dès le départ. Cependant, pour un grand nombre d'atomes, des effets relativistes sur des processus physiques deviennent très importants. Ces derniers ne peuvent pas être évalués comme des corrections relativistes d'ordre α^2 (α est la constante de structure fine) dans l'approximation de Hartree-Fock-Pauli [1-2] alors que les niveaux d'énergie des atomes et des ions en considération sont bien classifiés avec l'utilisation du couplage LS. Donc il est utile de disposer d'une méthode efficace qui combine entre les deux approches, e.g., un calcul qui débute par des fonctions d'onde de Dirac-Hartree-Fock dans le couplage jj et les résultats seront utilisés dans le couplage LS.

2. Aspects théoriques

2. 1. Différents couplages

Dans le couplage LS les interactions électrostatiques entre électrons sont plus fortes que les interactions entre le spin d'un électron et son propre mouvement orbital. Quand la charge Z augmente les interactions spin orbite deviennent plus importantes jusqu'à une limite où ces interactions deviennent plus fortes que les termes de Coulomb. Ainsi les conditions de couplage se rapprochent du couplage jj.

Cependant un couplage intermédiaire existe dans la limite où les termes de Coulomb sont comparables aux interactions spin-orbite. La matrice de l'Hamiltonien ne peut pas être diagonale ni dans la représentation LS ni dans la représentation jj. Les valeurs propres ne seront plus les éléments diagonaux de la matrice dans la représentation appropriée. La seule procédure est d'écrire la matrice de l'Hamiltonien complet dans une représentation appropriée. Ceci peut être fait, par exemple, par une matrice de passage de la représentation jj à la représentation LS ou par une matrice similaire de la représentation LS à la représentation jj.

2. 2. Calcul des éléments des matrices de transformation

Dans le cadre de l'étude des fonctions d'onde des atomes d'hélium nous avons utilisé les matrices de transformation entre les deux couplages LS et jj pour les coefficients de combinaison entre les états singulets et triplets. En effet la plus grande correction relativiste provient de la combinaison entre les états singulets et triplets de même nombres quantiques n, L et J dûe à l'Hamiltonien de structure fine. Les fonctions d'onde obtenues par la diagonalisation des matrices 2x2 (Hamiltonien incluant les corrections relativistes) sont [3] :

$$\psi(n^1L) = \cos \theta \psi_0(n^1L) + \sin \theta \psi_0(n^3L) \tag{1}$$

$$\psi(n^3L) = \sin \theta \psi_0(n^1L) + \cos \theta \psi_0(n^3L) \tag{2}$$

où ψ et ψ_0 désignent respectivement les fonctions d'onde des états considérés et les fonctions de la base choisie.

$\sin \theta$ et $\cos \theta$ présentent les angles de combinaison entre les états singulets et triplets pour l'hélium.

Les valeurs de $\sin \theta$ sont données par Drake [3] au tableau suivant :

Tableau 1 : Valeurs de $\sin \theta$ pour les différents états de l'He I.

Etat	$\sin \theta$	Etat	$\sin \theta$	Etat	$\sin \theta$
2P	0.0002783				
3P	0.0002558	3D	0.0156095		
4P	0.0002498	4D	0.0113960	4F	0.6041024
5P	0.0002473	5D	0.0101143	5F	0.5499291
6P	0.0002460	6D	0.0095289	6F	0.5180737
7P	0.0002452	7D	0.0092067	7F	0.4984184
8P	0.0002447	8D	0.0090087	8F	0.4855768
9P	0.0002444	9D	0.0088777	9F	0.4767620
10P	0.0002442	10D	0.0087862	10F	0.4704595
5G	0.6934752				
6G	0.6931996	6H	0.6962385		
7G	0.6929889	7H	0.6962377	7I	0.6979315
8G	0.6928356	8H	0.6962372	8I	0.6979315
9G	0.6927195	9H	0.6962374	9I	0.6979316
10G	0.6926329	10H	0.6962353	10I	0.6979316
8K	0.6991671				
9K	0.6991671	9L	0.7001089		
10K	0.6991671	10L	0.7007089	10M	0.7008507

On note que les corrections dues aux combinaisons entre états sont particulièrement significatives pour les transitions D-F et F-G [3] où le couplage intermédiaire est dominant.

Dans ce qui suit on va utiliser les matrices T de transformation entre les deux couplages LS et jj [4] à savoir :

$$\langle LS | j_1 j_2 \rangle = [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix} \quad (3)$$

où :

$$[L, S, j_1, j_2] = ((2L + 1)(2S + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)) \quad (4)$$

3. Application aux différents états de l'He I

3. 1. Etude des états 2^3P_1 et 2^1P_1

La matrice $M_{\{LS\}}$ des coefficients de combinaison dans la représentation LS dans les bases $|11\rangle$ et $|10\rangle$ est donnée par le tableau 1 à savoir :

$$\begin{pmatrix} |^3P_1\rangle \\ |^1P_1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm 0.99999996 & -0.00027829 \\ 0.00027829 & \pm 0.99999996 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |11\rangle \\ |10\rangle \end{pmatrix} \quad (5)$$

La matrice de passage T est calculée par le code 369j :

$$T \equiv \begin{pmatrix} 0.8164965 & -0.5773502 \\ 0.5773502 & 0.8164965 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Ainsi on obtient la matrice $M_{\{jj\}}$ des coefficients de combinaison dans la représentation jj:

$$\begin{aligned} M_{\{jj\}} &= M_{\{LS\}} T \\ &= \begin{pmatrix} 0.816335 & -0.57712 \\ \pm 0.57712 & \pm 0.81633 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

Le calcul par le programme FAC [5] donne pour les coefficients de combinaison dans la représentation jj pour les états 2^3P_1 et 2^1P_1 la matrice $M_{\{jj\}}$ telle que:

$$M_{\{jj\}} = \begin{pmatrix} -0.81638 & 0.57751 \\ -0.57751 & -0.81638 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Les résultats ainsi obtenus par notre calcul coïncident bien (à un facteur de phase près) avec ceux obtenus par Drake [3] après utilisation de la matrice de passage entre les deux couplages.

3. 2. Etude d'autres états P et D

De façon similaire que plus haut, nous avons étudié autres états P et D. A chaque fois on calcule la matrice de transformation T entre les deux bases de deux couplages et on compare ainsi les coefficients obtenus.

Le tableau 2 rassemble les résultats obtenus pour les coefficients de combinaison déduits de la transformation des coefficients de Drake sur la base LS et les coefficients de combinaison calculés par le programme FAC sur la base jj.

Le tableau 2 montre une bonne concordance entre les coefficients de combinaison des états singulets et triplets calculés par le programme FAC dans la base jj et ceux trouvés par transformation LS-jj des coefficients de Drake [3] dans la base LS. Cependant nous avons remarqué que le calcul pour les états F et G ne coïncide pas proprement pour les deux bases à cause du chevauchement de ces états F et G avec les autres états.

Tableau 2 : Comparaison des coefficients de combinaison entre états

Etat	Coefficients (LS→jj)		Coefficients (jj)	
3^3P_1	0.816348896	-0.5775590691	-0.81658757	0.57722156
3^1P_1	0.577559069	0.816348896	0.577221662	0.8165875045
3^3D_2	0.764629952	-0.644469571	0.776386032	-0.630257669
3^1D_2	0.644469571	0.764629952	-0.630257669	-0.776386032
4^3P_1	0.816352355	-0.577554178	-0.8165962	0.5772233
4^1P_1	0.577554178	0.816352355	0.5772231	0.8165864
4^3D_2	0.767338912	-0.641241758	-0.775931591	0.630817061
4^1D_2	0.641241758	0.767338912	-0.63081706	-0.77593159

6. Conclusion

Nous avons présenté dans ce travail, les matrices de passage entre les deux couplages LS et jj. Les résultats de calcul sur les états P et D de l'hélium ont montré une bonne concordance entre notre calcul basé sur le programme FAC et les résultats de Drake.

Références

- [1] A. A. Nikitin et Z. B. Rudzikas ; "Foundations of the Theory of the Spectra of Atoms and Ions", Nauka, Moscow (1983).
- [2] Z. B. Rudzikas ; "Theoretical Atomic Spectroscopy", cambridge University press, cambridge, (1997).
- [3] G.W.F. Drake ; "High Precision Calculations for Helium, Atomic Molecular Optical Physics Handbook", edited by G.W.F. Drake, AIP Press, New York (1996).
- [4] R. D. Cowan ; "The Theory of atomic structure and spectra", University of California Press, London, England (1981).
- [5] M. F. Gu ; FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>