

## Atomic fine and hyperfine structure in a space of constant curvature

This article has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text article.

1986 J. Phys. A: Math. Gen. 19 717

(<http://iopscience.iop.org/0305-4470/19/5/025>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 129.252.86.83

The article was downloaded on 31/05/2010 at 11:56

Please note that [terms and conditions apply](#).

## Structure fine et hyperfine atomique dans un espace à courbure constante

R Shamseddine

Département de physique, Faculté des Sciences de Tunis, Campus Universitaire, Belvédère, Tunis, Tunisia

Reçu le 10 avril 1985, présentation définitive le 22 juillet 1985

**Résumé.** Les termes d'énergie de structure fine et hyperfine de l'atome hydrogénéoïde dans l'espace sphérique sont obtenus en fonction des nombres quantiques. Il est trouvé que les niveaux d'énergie dégénérés de structure fine sont dédoublés par le terme de courbure  $\pm Ba_0^2(j + \frac{1}{2})/2R^2$ .

## Atomic fine and hyperfine structure in a space of constant curvature

**Abstract.** The fine and hyperfine structure energy terms of the hydrogenic atom in spherical space are obtained as functions of quantum numbers. It is found that the degenerate fine structure energy levels are split by the curvature correction  $\pm Ba_0^2(j + \frac{1}{2})/2R^2$ .

### 1. Introduction

On peut obtenir une première idée des effets liés à un changement de topologie de l'espace sur les spectres des atomes en remplaçant, dans les calculs de spectroscopie, l'espace euclidien par un espace à courbure constante positive ou espace sphérique. Si le traitement des équations d'onde fondamentales gouvernant le mouvement de l'électron n'est pas plus compliqué dans l'espace sphérique que dans l'espace euclidien, il sera possible de construire un modèle de l'atome avec des orbitales 'courbées' qui rendra compte des effets globaux dûs à la topologie de l'espace sur les spectres atomiques. D'autre part, la formulation de la spectroscopie théorique dans l'espace sphérique, qui contient la formulation euclidienne comme cas limite quand le rayon de courbure de l'espace  $R$  tend vers l'infini, peut être avantageuse pour retrouver certains résultats de calculs atomiques et moléculaires dans l'espace euclidien (Teague 1973, Horak 1982).

Ce travail présente une étude non-relativiste complète de la structure fine et hyperfine de l'atome hydrogénéoïde dans l'espace sphérique. Dans une première publication (Bessis *et al* 1982) qui sera notée par I, nous avons obtenu la forme covariante de l'équation de Pauli et nous avons calculé les corrections de courbure aux niveaux d'énergie de structure fine dans les cas particuliers  $l = n - 1$  et  $l = n - 2$ . Dans une seconde publication (Bessis *et al* 1984) qui sera notée par II, nous avons obtenu les

expressions de l'énergie de structure fine et des orbitales de Dirac approchées en résolvant l'équation de Dirac par perturbation. Le présent travail généralise les résultats de la publication I et donne pour la première fois, les corrections de courbure aux niveaux d'énergie de structure hyperfine. L'approche non-relativiste se justifie par le fait que l'équation de Dirac dans l'espace sphérique n'a pas encore connu une résolution exacte. Le traitement approché de cette équation donne bien l'expression de l'énergie de structure fine, mais il ne permet pas l'obtention de celle de l'énergie de structure hyperfine. Dans ce dernier cas les éléments de matrices entre orbitales de Dirac approchées sont difficiles à calculer (voir publication II). D'autre part, comme il a été signalé dans les publications I et II, notre calcul de perturbation qui se fait dans la base des fonctions d'onde hydrogénéoïdes 'courbées' diffère de ceux de Turrenc et Grossiord (1976), Parker (1980), Parker et Pimentel (1982) qui se font dans la base des fonctions d'onde hydrogénéoïdes 'euclidiennes'.

## 2. Structure fine dans l'espace sphérique

En l'absence du champ magnétique extérieur, l'équation de Pauli dans l'espace sphérique s'écrit (voir publication I)

$$[-\hbar^2\Delta/2m + eV + W_f + W_c]\Phi = E\Phi \quad (1)$$

où  $\Delta = (R^2 \sin^2 \chi)^{-1}[(\partial/\partial\chi)(\sin^2 \chi \partial/\partial\chi) - l^2]$  est le laplacien dans l'espace sphérique.  $V = -(Ze/R) \cot \chi$  est le potentiel coulombien central.

$$W_f = W_{so} + W_{mv} + W_D = \frac{Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{l \cdot s}{R^3 \sin^3 \chi} - \frac{(E - eV)^2}{2mc^2} + \frac{Ze^2 \hbar^2 \pi}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r}),$$

$$W_c = \frac{3\hbar^2}{4mR^2} + \frac{\hbar^2(1 - \cos \chi)l \cdot s}{mR^2 \sin^2 \chi} + \frac{\hbar^2(1 - \cos \chi)^2}{4mR^2 \sin^2 \chi} + \frac{Ze^2 \hbar^2(1 - \cos \chi)}{4m^2 c^2 R^3 \sin^3 \chi},$$

$$s = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}; \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

où

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

sont les matrices de Pauli.  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\chi, \theta, \varphi)$  avec  $0 \leq \chi \leq \pi$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$  et  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ .

Les trois termes de l'hamiltonien de structure fine  $W_f$  représentent respectivement l'interaction spin-orbite de Landé, la correction relativiste et le terme de contact de Darwin.  $W_c$  est dû à la courbure de l'espace et s'annule à la limite plane quand  $R \rightarrow \infty$ . Le premier terme de  $W_c$  représente l'interaction spin-courbure, le deuxième terme a la même dépendance en les variables angulaires  $(\theta, \varphi)$  et spin que le terme de Landé.

Les contributions énergétiques  $E_f$  et  $E_c$  des termes  $W_f$  et  $W_c$  sont calculées par perturbation sur la base des fonctions d'onde hydrogénéoïdes 'courbées'  $|nlm\rangle$  (voir Bessis et Bessis 1979). Ecrivons les différentes contributions à l'énergie totale  $E$ . On trouve

$$E = E_0 + E_f + E_c \quad (2)$$

où  $E_0 = -BZ^2/n^2 + Ba_0^2(n^2 - 1)/R^2$  est la valeur propre de l'équation de Schrödinger hydrogénéoïde dans l'espace sphérique (Schrödinger 1940).  $B = me^4/2\hbar^2$  est le Rydberg;  $a_0 = \hbar^2/me^2$  est le rayon de Bohr.

Donnons d'abord l'expression de l'énergie  $E_f$ . Dans le cas  $l \neq 0$ , la contribution  $E_D$  du terme de Darwin  $W_D$  est nulle car celui-ci n'affecte que les états  $s$  ( $l=0$ ) qui sont les seuls pour lesquels  $|nlm\rangle \neq 0$  à l'origine. Avec la valeur de l'intégrale pseudo-radiale  $\langle nl|(R \sin \chi)^{-3}|nl\rangle$  en fonction des nombres quantiques (Bessis et Bessis 1983), l'énergie d'interaction spin-orbite  $E_{so} = \langle nlm|W_{so}|nlm\rangle$  s'écrit

$$E_{so} = \frac{BZ^4 \alpha^2}{2} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]}{n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \left( 1 + \frac{a_0^2}{Z^2 R^2} \frac{n[4n^3 + l(l+1)(2l+1)]}{4} \right). \quad (3)$$

$\alpha = e^2/\hbar c$  est la constante de structure fine.

L'expression de la correction relativiste  $E_{mv} = \langle nlm|W_{mv}|nlm\rangle$  s'écrit (voir publication I)

$$E_{mv} = \frac{BZ^4 \alpha^2}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l+\frac{1}{2}} \right) + \frac{BZ^2 \alpha^2 a_0^2}{2R^2} \left( 1 + \frac{1}{n^2} - \frac{2n}{l+\frac{1}{2}} \right). \quad (4)$$

Pour les états  $l \neq 0$ , l'énergie  $E_f = E_{so} + E_{mv}$  s'écrit

$$E_f = \frac{BZ^4 \alpha^2}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}} \right) + \frac{BZ^2 \alpha^2 a_0^2}{2R^2} \left( 1 - \frac{2n}{j+\frac{1}{2}} \pm \frac{j+\frac{1}{2}}{2n^2} + \frac{1}{2n^2} \right) \quad (5)$$

où les signes ( $\pm$ ) correspondent aux valeurs  $j = 1 \pm \frac{1}{2}$ . La formule (5) est valable pour  $l=0$ . En effet l'expression de  $E_{mv}$  (4) est valable pour  $l=0$ , et l'expression de  $E_{so}$  (3) se réduit pour  $l=0$  ( $j = \frac{1}{2}$ ) à celle de l'énergie due au terme de Darwin

$$E_D = \frac{BZ^4 \alpha^2}{n^3} \left( 1 + \frac{a_0^2 n^4}{Z^2 R^2} \right). \quad (6)$$

Pour obtenir (6), nous avons utilisé l'expression de la fonction d'onde hydrogénoïde 'courbée' à l'origine  $\Phi_{n00}(0) = (Z/na_0)^{3/2} (1 + a_0^2 n^4 / Z^2 R^2)^{1/2} / \sqrt{\pi}$  dont le calcul se ramène à des intégrales élémentaires données par les tables (Gradshteyn et Ryzhik 1965). La formule (6) corrige l'erreur concernant l'absence des corrections de courbure dans le résultat ' $E_D = BZ^4 \alpha^2 / n^3$ ' de la publication I.

D'autre part, tenant compte des valeurs des intégrales pseudo-radiales  $\alpha_i = \langle nl|(1 - \cos \chi)/(R \sin \chi)^{i+1}|nl\rangle$  ( $i=1, 2$ ), en fonction des nombres quantiques (voir Bessis et Bessis 1983), l'expression de l'énergie  $E_c = \langle nlm|W_c|nlm\rangle$  s'écrit

$$E_c = \frac{Ba_0^2}{R^2} \pm \frac{Ba_0^2(j+\frac{1}{2})}{2R^2} + \frac{BZ^2 \alpha^2 a_0^2}{4R^2 n^2}. \quad (7)$$

Les signes ( $\pm$ ) correspondent aux valeurs  $j = 1 \pm \frac{1}{2}$ .

Finalement l'énergie totale  $E = E_0 + E_f + E_c$  s'écrit

$$E = E_n + E_{nlj} \quad (8)$$

où

$$E_n = -\frac{BZ^2}{n^2} + \frac{Ba_0^2 n^2}{R^2},$$

$$E_{nlj} = \frac{BZ^4 \alpha^2}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}} \right) \pm \frac{Ba_0^2(j+\frac{1}{2})}{2R^2} + \frac{BZ^2 \alpha^2 a_0^2}{2R^2} \left( 1 - \frac{2n}{j+\frac{1}{2}} \pm \frac{j+\frac{1}{2}}{2n^2} + \frac{1}{n^2} \right).$$

Cette formule généralise les résultats de la publication I qui ont concerné les cas particuliers  $l = n-1$  et  $l = n-2$ .  $E_{nlj}$  diffère de l'expression obtenue par la résolution approchée de l'équation de Dirac (voir publication II) par le terme  $BZ^2 \alpha^2 a_0^2 [\pm(j+\frac{1}{2}) + 1]/2R^2 n^2$ . Cette différence s'explique par le fait que  $E_{nlj}$  est calculée sur la base des

solutions propres de l'équation de Schrödinger. Mais à la limite non-relativiste ( $1/c \rightarrow 0$ ) l'équation de Pauli (1) tend vers une équation qui diffère de celle de Schrödinger par les trois premiers termes de  $W_c$  (voir équation (1)). Négliger ces termes qui sont en  $1/R^2$  se répercute sur la partie en  $\alpha^2/R^2$  de l'expression de l'énergie. D'autre part il est évident que les termes d'ordre  $\alpha^2/R^2$  de l'énergie sont générés par les termes en  $\alpha^2 = 1/c^2$  des hamiltoniens  $W_f$  et  $W_c$ . Alors aux termes d'ordre supérieur à  $\alpha^2$ ,  $\alpha^4$  par exemple, que nous avons négligés dans  $W_f$  et  $W_c$  devra correspondre des termes énergétiques d'ordre  $\alpha^4/R^2 \ll \alpha^2/R^2$ . Ceci reste vrai dans une région de forte courbure et justifie donc la négligence des termes d'ordre supérieur à  $\alpha^2$  dans l'équation de Pauli.

A la limite plane ( $R \rightarrow \infty$ ), les termes en  $1/R^2$  s'annulent et l'expression de  $E_{nlj}$  (voir équation (8)) se réduit à celle de l'énergie de structure fine dans l'espace plan. Les termes en  $\pm(j + \frac{1}{2})$  dans l'expression de  $E_{nlj}$  font que chaque niveau 'j' de structure fine 'plane' qui était dégénéré en  $l$  se dédouble. Celui qui n'était pas dégénéré se déplace. Ainsi l'effet de courbure lève la dégénérescence en  $l$  des niveaux 'j' de structure fine 'plane' et des nouvelles raies apparaissent. Ce résultat est comparable qualitativement à celui de l'effet Lamb. La contribution énergétique de l'effet Lamb est<sup>†</sup>  $W_L = \pm 2BZ^4\alpha^2\mathcal{H}/n^3(j + \frac{1}{2})(2l + 1)$  où  $\mathcal{H} = 1.59644 \times 10^{-3}$  (Durand 1976). Les signes ( $\pm$ ) correspondent aux valeurs  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . Pour un niveau 'j' donné, l'écart du dédoublement dû à l'effet de courbure  $|\delta_c| \approx Ba_0^2(j + \frac{1}{2})/R^2$  aurait l'ordre de grandeur de l'écart du dédoublement de Lamb  $|\delta_L| = 2BZ^4\alpha^2\mathcal{H}/n^3(j + 1)$ , si  $R \approx$

Table 1. Comparaison des corrections de courbure avec les contributions classiques (en ua).  
Table 1. Comparison of curvature corrections with classical contributions (in au).

Energie électronique	Energies de structure fine	Corrections dues à l'effet de courbure de l'espace	Corrections dues à l'effet Lamb
$E_{nn-1n-1;2}$	$-\frac{Z^4\alpha^2}{8n^4}$	$\frac{n}{4R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(-1 + \frac{1}{2n} + \frac{1}{n^2}\right)$	$\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{n^4(2n-1)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$E_{nf5;2}$	$\frac{Z^4\alpha^2}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{3}\right)$	$-\frac{3}{4R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(1 - \frac{2n}{3} - \frac{1}{2n^2}\right)$	$-\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{21n^3}$
$E_{nds;2}$	$-\frac{Z^2}{2n^2} + \frac{n^2}{2R^2}$	$\frac{3}{4R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(1 - \frac{2n}{3} + \frac{5}{2n^2}\right)$	$\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{15n^3}$
$E_{nds;2}$	$\frac{Z^4\alpha^2}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{2}\right)$	$-\frac{1}{2R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} (1 - n)$	$-\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{10n^3}$
$E_{nps;2}$		$\frac{1}{2R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(1 - n + \frac{2}{n^2}\right)$	$\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{6n^3}$
$E_{nps;2}$	$\frac{Z^4\alpha^2}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - 1\right)$	$-\frac{1}{4R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(1 - 2n + \frac{1}{2n^2}\right)$	$-\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{3n^3}$
$E_{ns1;2}$		$\frac{1}{4R^2} + \frac{Z^2\alpha^2}{4R^2} \left(1 - 2n + \frac{3}{2n^2}\right)$	$\frac{Z^4\alpha^2\mathcal{H}}{n^3}$

<sup>†</sup>Cette formule est obtenue par un calcul non-relativiste et donne des valeurs faibles devant les valeurs observées. Seule la théorie quantique des champs peut rendre compte avec précision de ces dernières.

$\{n[nj(j+1)(2j+1)]^{1/2}/Z^2\}10^{-6}$  cm. Sachant que des atomes hautement excités avec  $n = 350$  sont observés en radio-astronomie (voir Parker et Pimentel 1982), nous obtenons pour  $n = 350$  la valeur suivante  $R \approx \{6.5[j(j+1)(2j+1)]^{1/2}/Z^2\}10^{-3}$  cm. Les corrections de courbure sont donc observables seulement dans des régions de forte courbure. La table 1 reporte les corrections de courbure comparativement avec les contributions classiques.

### 3. Structure hyperfine dans l'espace sphérique

L'hamiltonien non-relativiste de structure hyperfine d'un atome hydrogénoïde dans l'espace sphérique est donné dans la publication II. Dans l'ordre de calculer l'énergie de structure hyperfine, cet hamiltonien peut s'écrire convenablement (voir appendice)

$$W_{hr} = -2\beta\mu_N g_N \mathbf{I} \cdot \mathbf{T}^{(1)}, \quad (9)$$

$$\mathbf{T}^{(1)} = \mathbf{T}_l^{(1)} + \mathbf{T}_d^{(1)} + \mathbf{T}_c^{(1)},$$

où

$$\mathbf{T}_l^{(1)} = f_1 \mathbf{l}, \quad f_1 = \frac{\cos \chi}{R^3 \sin^3 \chi},$$

$$\mathbf{T}_d^{(1)} = f_2 [s - 3(\mathbf{u} \cdot \mathbf{s})\mathbf{u}], \quad f_2 = \frac{3 - (1 - \cos \chi)(2 + \cos \chi)}{3R^3 \sin^3 \chi} - \frac{r_0}{9R^2 r^2},$$

$$\mathbf{T}_c^{(1)} = [f_3 + \frac{8}{3}\pi\delta(\mathbf{r})]\mathbf{s}, \quad f_3 = -\frac{2(1 - \cos \chi)^2}{3R^3 \sin^3 \chi} + 2\frac{r_0}{9R^2 r^2}.$$

$\beta = e\hbar/2mc$  est le magnéton de Bohr.  $\boldsymbol{\mu} = \mu_N g_N \mathbf{I}$  est le moment dipolaire magnétique du noyau,  $\mu_N = e\hbar/2Mc$  est le magnéton nucléaire,  $g_N$  est le rapport gyromagnétique du noyau et  $I$  son spin.  $\mathbf{u} = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{i} + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{j} + \cos \theta \mathbf{k}$  où  $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  est la base cartésienne orthonormée locale d'origine  $O$  ( $\chi = 0$ ).  $r_0 = Ze^2/2mc^2$ . Les indices  $l, d$  et  $c$  indiquent la dépendance orbitale, dipolaire et de contact.

Le traitement par perturbation de l'hamiltonien  $W_{hr}$  (9) se fait formellement comme dans l'espace plan. En utilisant le théorème de projection pour l'opérateur vectoriel  $\mathbf{T}^{(1)}$  à l'intérieur du sous-espace propre associé à un niveau d'énergie donné de structure fine, le hamiltonien  $W_{hr}$  (9) s'écrit pour les états  $l \neq 0$ .

$$W_{hr} = b \mathbf{I} \cdot \mathbf{j}, \quad (10)$$

$$b = -\frac{\beta\mu_N g_N}{j(j+1)} \{ [j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4}] \alpha_1 + [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \alpha_2$$

$$+ [j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}] \alpha_3 \}.$$

Les valeurs des intégrales pseudo-radiales  $\alpha_i = \langle nl | f_i | nl \rangle$  ( $i = 1, 2, 3$ ) en fonction des nombres quantiques sont obtenues en utilisant les résultats de (Bessis et Bessis 1983). L'opérateur  $(\mathbf{I} \cdot \mathbf{j})$  est diagonal dans la base  $|jIFm_F\rangle$  qui est formée par les états propres communs aux opérateurs  $\mathbf{J}^2, \mathbf{I}^2, \mathbf{F}^2$  et  $F_z$  où  $\mathbf{j}$  et  $\mathbf{F}$  sont les moments angulaires totaux de l'électron et de l'atome respectivement, et  $F_z$  est la projection de  $\mathbf{F}$  sur l'axe des  $z$ . Finalement l'expression de l'énergie de structure hyperfine dipolaire magnétique

de l'atome hydrogénoïde dans l'espace sphérique s'écrit

$$E = b \langle jIFm_F | \mathbf{I} \cdot \mathbf{j} | jIFm_F \rangle = \frac{1}{2} b [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)] \quad (11)$$

où

$$b = -\frac{2\beta\mu_N g_N l(l+1)}{j(j+1)} \xi_{nl} \left( 1 + \frac{a_0 n^4}{Z^2 R^2} \pm \frac{a_0 r_0 (2j+1)}{6Z^2 R^2} \right),$$

$$\xi_{nl} = Z^3 / a_0^3 n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2}), \quad l \neq 0.$$

Les signes ( $\pm$ ) correspondent aux valeurs  $j = 1 \pm \frac{1}{2}$ .

A la limite plane ( $R \rightarrow \infty$ ), l'expression (11) se réduit à celle de l'énergie de structure hyperfine dans l'espace plan. Comme dans le cas plan, les diverses valeurs de  $F = j + I$ ,  $j + I - 1, \dots, |j - I|$  fournissent la règle d'intervalles pour les multiplets de structure hyperfine. L'effet de courbure se traduit seulement par le déplacement des différents niveaux hyperfins. L'écart  $\delta E = bF$  entre deux niveaux hyperfins voisins d'un multiplet dans l'espace sphérique diffère de son homologue  $\bar{\delta E} = \bar{b}F$  dans l'espace plan par le terme de courbure

$$\delta E - \bar{\delta E} = \frac{a_0^2 \bar{b} F}{Z^2 R^2} \left( n^4 \pm \frac{r_0 (2j+1)}{6a_0} \right) \quad (12)$$

où

$$\bar{b} = -2\beta\mu_N g_N l(l+1) \xi_{nl} / j(j+1).$$

Pour les états  $s(l=0)$ , comme dans le cas plan (Blinder 1965), les contributions des parts orbitale et dipolaire de  $W_{\text{hf}}$  (9) sont nulles. Un calcul analogue au cas précédent ( $l \neq 0$ ) donne

$$E = \frac{1}{2} b [F(F+1) - \frac{3}{4} - I(I+1)] \quad (13)$$

où

$$b = -\frac{16\beta\mu_N g_N Z^3}{3a_0^2 n^3} \left( 1 + \frac{a_0 r_0}{12Z^2 R^2} \right).$$

A la limite plane ( $R \rightarrow \infty$ ) l'expression (13) tend vers son homologue dans l'espace plan. Comme dans le cas plan,  $F$  est limité aux deux valeurs ( $I \pm \frac{1}{2}$ ) et chaque niveau  $n S_{1/2}$  se scinde en deux niveaux hyperfins. L'écart  $\delta E = b(I + \frac{1}{2})$  entre les niveaux d'un doublet hyperfin dans l'espace sphérique diffère de son homologue  $\bar{\delta E} = \bar{b}(I + \frac{1}{2})$  dans l'espace plan par le terme de courbure

$$\delta E - \bar{\delta E} = \frac{a_0 r_0 \bar{b} (I + \frac{1}{2})}{12Z^2 R^2} \quad (14)$$

où

$$\bar{b} = -16\beta\mu_N g_N Z^3 / 3a_0^3 n^3.$$

Pour  $Z = 1$ ,  $I = \frac{1}{2}$  et  $n = 1$  nous déduisons de l'expression (14) la correction de courbure de la fréquence de la raie à 21 cm de longueur d'onde de l'atome d'hydrogène. On trouve

$$|\delta E - \bar{\delta E}| / h = 4\beta\mu_N g_N r_0 / 9a_0^2 R^2 h. \quad (15)$$

Ce terme de courbure aura l'ordre de grandeur de la précision expérimentale†  $10^{-9}$  Mc/s dans des régions de l'espace dont le rayon de courbure est de l'ordre de  $10^{-2}$  cm.

#### 4. Conclusion

Nous avons montré que tous les niveaux d'énergie du spectre de l'atome hydrogénoïde: électroniques, de structure fine et hyperfine subissent des déplacements dûs à la courbure de l'espace et dont les expressions en fonction des nombres quantiques ont été données. Particulièrement, ces déplacements sont proportionnels à la puissance quatrième du nombre quantique principal  $n$  et deviennent donc plus importants pour les atomes hautement excités. De plus l'effet de courbure lève la dégénérescence des niveaux dégénérés de structure fine et fait apparaître des nouvelles raies. Dans ce sens, l'effet de courbure joue un rôle analogue à celui de l'effet Lamb.

Evidemment, les corrections de courbure aux énergies 'planes' sont extrêmement petites lorsque l'on prend pour valeur de  $R$  celle du rayon de courbure de l'espace ( $R \approx 10^{26}$  cm) (Steinmetz 1976) et donc non détectables en laboratoire. Néanmoins, comme il a été signalé par Parker (1980), Parker et Pimentel (1982), ces corrections de courbure auront des grandeurs observables dans des régions de l'espace de forte courbure. Alors la mise en évidence de leur dépendance en les nombres quantiques peut permettre de différencier l'effet de courbure locale de l'espace des autres effets: Doppler, gravitationnel, radiatif.

#### Appendice. Obtention du terme de contact de Fermi

Au voisinage de l'origine  $\chi = 0$ , on peut écrire  $(\cot \chi)/R \approx 1/r - r/3R^2$  avec  $r = R\chi$  fini. La fonction  $Q(\chi) = [1 + (E + (Ze^2/R) \cot \chi/2mc^2)]^{-1}$  et sa dérivée première auront les expressions approchées  $Q(\chi) = (1 + E/2mc^2 + r_0/r - r_0r/3R^2)^{-1}$  et  $dQ(\chi)/R d\chi = Q^2(\chi)(1/r^2 + 1/3R^2)r_0$ , où  $r_0 = Ze^2/2mc^2$ . Ayant  $r \ll R^2$  on peut écrire  $Q(\chi) \approx Q(r) = [1 + (E + Ze^2/r)/2mc^2]^{-1}$  et  $dQ(\chi)/R d\chi = dQ(r)/dr + Q^2(r)r_0/3R^2$ . Au voisinage de l'origine ( $\chi = 0$ ), la dérivée  $dQ(r)/dr$  peut être assimilée approximativement à une fonction de Dirac  $\delta(r)$  (Blinder 1965):  $dQ(r)/dr \approx \delta(r) = 4\pi r^2 \delta(\mathbf{r})$  où  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(r, \theta, \varphi)$ . Le troisième terme de l'hamiltonien  $W_{\text{hf}}$  (voir publication II) s'écrit alors

$$2\beta \frac{1}{Q(\chi)} \frac{dQ(\chi)}{d\chi} \frac{\cos \chi}{R^3 \sin^2 \chi} \boldsymbol{\mu} \cdot [\mathbf{s} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}) \mathbf{u}]$$

$$= 2\beta \left( 4\pi \delta(\mathbf{r}) + \frac{r_0}{3R^2 r^2} \right) \boldsymbol{\mu} \cdot [\mathbf{s} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{s}) \mathbf{u}]$$

on reconnaît dans le second membre, le terme de contact de Fermi dans l'espace plan plus un terme dû à la courbure de l'espace et qui s'annule quand  $R \rightarrow \infty$ .

Tenant compte de l'expression ci-haut, on vérifie facilement que l'expression de l'hamiltonien  $W_{\text{hf}}$  (voir publication II) peut être écrite sous la forme donnée par l'équation (9).

† Actuellement la fréquence  $|\delta E|/h$  est connue expérimentalement avec une grande précision:  $|\delta E|/h = 1420.405\ 751\ 768 \pm 10^{-9}$  Mc/s (Cohen-Tannoudji *et al* 1973).



**References**

- Bessis N et Bessis G 1979 *J. Phys. A: Math. Gen.* **12** 1991  
— 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** L467  
Bessis N, Bessis G et Shamseddine R 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** 3131  
— 1984 *Phys. Rev. A* **29** 2375  
Blinder S M 1965 *Advances in Quantum Chemistry* vol 2 (New York: Academic) pp 47 et seq.  
Cohen-Tannoudji C, Diu B et Laloë F 1973 *Mécanique Quantique* vol 2 (Paris: Hermann)  
Durand E 1976 *Mécanique Quantique* vol 2 (Paris: Masson)  
Gradshteyn I S and Ryzhik I M 1965 *Tables of integrals, series and products* (New York: Academic)  
Horak Z J 1982 *Phys. Lett.* **90A** 31  
Parker L 1980 *Phys. Rev. D* **22** 1922  
Parker L and Pimentel L O 1982 *Phys. Rev. D* **25** 3180  
Schrödinger E 1940 *Proc. Irish Acad. A* **46** 9  
Steinmetz C P 1976 *Four lectures on relativity and space* (New York: Dover)  
Teague J F 1973 *PhD Thesis, Raleigh University North Carolina* (unpublished)  
Tourrenc P et Grossiord J L 1976 *Nuovo Cimento B* **32** 163