**SUR L'EFFET
D'UN MOMENT DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE
DU NOYAU SUR LES NIVEAUX D'ÉNERGIE
D'UN ATOME DANS UN CHAMP
ÉLECTRIQUE UNIFORME**

Par J. P. BARRAT,

Laboratoire de Physique de l'École Normale Supérieure,
Paris.

Un grand intérêt s'attache actuellement à la détermination d'une limite supérieure pour le moment dipolaire électrique des particules élémentaires. On a pu fixer une limite très petite dans le cas du neutron ($< e \times 5.10^{-20}$ cm) [1], mais les déterminations dans le cas du proton et de l'électron sont beaucoup moins précises ($\sim e \times 10^{-13}$ cm) [2]. La grande finesse des raies de résonance magnétique observées dans les états fondamentaux de certains atomes (métaux alcalins, isotope ^{199}Hg) [3] suggère de tenter d'établir une telle limite avec une grande précision en étudiant l'effet Stark de ces niveaux. On s'attendrait en effet à ce que l'interaction d'un moment dipolaire électrique nucléaire $\mathbf{d} = d\mathbf{I}$ ($\mathbf{I}$ = spin nucléaire) avec un champ électrique uniforme $\mathbf{E}$ donne lieu à un effet Stark linéaire (interaction $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$) que l'on essaierait de mettre en évidence en le séparant de l'effet Stark quadratique normal (d'ailleurs très faibles pour ces niveaux). Salpeter [2] a fait remarquer que l'effet Stark linéaire de l'atome d'hydrogène reste en réalité nul, même si l'électron porte un moment dipolaire électrique, tout au moins dans une approximation non relativiste. Le but de cette note est de généraliser ce résultat au cas d'un atome quelconque, dans le cas où le noyau serait porteur d'un moment dipolaire électrique $d\mathbf{I}$, et de l'interpréter physiquement.

Soient $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_Z$ les coordonnées des Z électrons de l'atome. Le champ créé par l'électron i au niveau du noyau est

$$-\frac{1}{Z} \nabla_i \left(\frac{Ze}{r_i} \right) = -\frac{1}{Z} \nabla_i V(r_i)$$

où $V(r_i) = \frac{Ze}{r_i}$ est le potentiel coulombien dû au noyau.

L'hamiltonien en l'absence de champ extérieur est, dans une approximation non relativiste qui néglige le couplage spin-orbite.

$$H_0 = \sum_{i=1}^Z \left[\frac{p_i^2}{2m} - eV(r_i) \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^Z V(r_{ij}) + \frac{d}{Z} \sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot \nabla_i V(r_i) \quad (1)$$

où

$$V(r_{ij}) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad \mathbf{p}_i = -i\hbar \nabla_i. \quad (2)$$

L'interaction avec un champ électrique uniforme $\mathbf{E}$

dérivant du potentiel $\Phi(\mathbf{r})$ correspond à l'hamiltonien perturbateur

$$H_1 = - \sum_{i=1}^Z e \Phi(r_i) - d\mathbf{I} \cdot \mathbf{E} = - \sum_{i=1}^Z e \Phi(r_i) + \frac{d}{Z} \sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot \nabla_i \Phi(r_i) \quad (3)$$

puisque $\nabla_i \Phi(r_i) = -\mathbf{E}$ est indépendant de i .
L'hamiltonien total s'écrit :

$$H_0 + H_1 = H_e + H_d, \quad (4)$$

où

$$H_e = \sum_{i=1}^Z \left\{ \frac{p_i^2}{2m} - eV(r_i) - e \Phi(r_i) \right\} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^Z V(r_{ij}) \quad (5)$$

$$H_d = \frac{d}{Z} \sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot (\nabla_i V(r_i) + \nabla_i \Phi(r_i)) \quad (6)$$

H_e est l'hamiltonien de l'ensemble des électrons, H_d celui du moment dipolaire nucléaire.

Le calcul se poursuit alors comme dans le cas examiné par Salpeter [2]. On suppose que H_e a été diagonalisé et on traite H_d comme une perturbation ; seuls les termes du 1^{er} ordre sont linéaires en d et $\mathbf{E}$. On remarque que :

$$H_d = \frac{id}{Z\hbar} \sum_{i=1}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, V(r_i) + \Phi(r_i)] = \frac{id}{Z\hbar} \sum_{i,j=1}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, V(r_{ij}) + \Phi(r_{ij})] \quad (7)$$

puisque $\mathbf{p}_i$ commute avec $V(r_j) + \Phi(r_j)$ pour $j \neq i$.
D'après (5), (7) s'écrit :

$$H_d = \frac{id}{Ze\hbar} \sum_{i=1}^Z \left[\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, -H_e + \sum_{j=1}^Z \frac{p_j^2}{2m} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j>k}}^Z V(r_{jk}) \right]. \quad (8)$$

Or $\mathbf{p}_i$ commute avec $\mathbf{p}_j$, et avec $V(r_{jk})$ sauf pour $i = j$ ou $i = k$. Donc

$$H_d = \frac{id}{Ze\hbar} \sum_{i=1}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, H_e] + \frac{id}{Ze\hbar} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, V(r_{ij})] = \frac{id}{Ze\hbar} \sum_{i=1}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, H_e] + \frac{d}{Ze} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^Z \mathbf{I} \cdot \{ \nabla_i V(r_{ij}) + \nabla_j V(r_{ij}) \} \quad (9)$$

Le facteur $\mathbf{I}$ dans le dernier terme est nul (*). Quant au 1^{er} terme, ses éléments de matrice sont nuls entre états propres de H_e ayant la même valeur propre (c'est-à-dire ses éléments diagonaux ou entre états

(*) $\sum_i \mathbf{p}_i$ commute *a priori* avec $\sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j>k}} V(r_{jk})$ parce

que $\sum_i \mathbf{p}_i$ est lié à l'opérateur représentant une translation infinitésimale de l'ensemble des électrons et que

$$\sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j>k}} V(r_{jk})$$

est invariant par translation.

dégénérés). Donc H_a ne perturbe pas au 1^{er} ordre les niveaux d'énergie de H_e . Le calcul est analogue et la conclusion reste la même si ce sont les électrons qui portent des moments dipolaires électriques.

L'origine physique du résultat est l'interaction avec $\mathbf{E}$ du moment dipolaire électrique induit dans l'atmosphère électronique par le moment permanent du noyau. En effet soient H_{e0} et H_{d0} les hamiltoniens H_e et H_d en l'absence de champ extérieur, H_{e1} et H_{d1} les termes de H_e et de H_d dépendant du champ extérieur. On peut retrouver le résultat précédent en diagonalisant d'abord $H_{e0} + H_{d0}$ et en calculant l'effet sur ses états propres (déterminés au 1^{er} ordre en d) de la perturbation $H_{e1} + H_{d1}$. Soient u_n les états propres de H_{e0} , d'énergie E_n (les états de même n et de α différents sont dégénérés et on suppose qu'ils ont la même parité) et $v_{n\alpha} = u_{n\alpha} + w_{n\alpha}$ les états propres de $H_{e0} + H_{d0}$ au 1^{er} ordre en d . H_{d0} étant impair n'a pas d'éléments diagonaux et :

$$w_{n\alpha} = \sum_{\substack{m\beta \\ m \neq n}} \frac{\langle u_{m\beta} | H_{d0} | u_{n\alpha} \rangle}{E_n - E_m} u_{m\beta}. \quad (10)$$

Dans (10), les seuls termes non nuls correspondent à des états $u_{m\beta}$ de parité opposée à celle de l'état $u_{n\alpha}$. On montre comme ci-dessus (équations (7) à (9)) que :

$$H_{e0} = -\frac{id}{Ze\hbar} \sum_{i=1}^Z [\mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, H_{e0}]$$

D'où :

$$\begin{aligned} w_{n\alpha} &= -\frac{id}{Ze\hbar} \left(\sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i \right) u_{n\alpha} \\ v_{n\alpha} &= \left(1 - \frac{id}{Ze\hbar} \sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i \right) u_{n\alpha} \end{aligned} \quad (11)$$

$v_{n\alpha}$ n'a pas une parité bien déterminée, puisque $w_{n\alpha}$ et $u_{n\alpha}$ sont des parités opposées. Un moment dipolaire est donc induit dans l'atmosphère électronique ($v_{n\alpha}$ se déduit de $u_{n\alpha}$ par une translation). En présence du champ $\mathbf{E}$, le déplacement d'énergie linéaire en E s'obtient en diagonalisant $H_{e1} + H_{d1}$ pour les états $v_{n\alpha}$ qui peuvent rester dégénérés. Au 1^{er} ordre en d :

$$\begin{aligned} \langle v_{n\alpha} | H_{d1} + H_{e1} | v_{n\alpha'} \rangle &= \langle u_{n\alpha} | H_{d1} | u_{n\alpha'} \rangle \\ &+ \frac{id}{Ze\hbar} \langle u_{n\alpha} | \left[\sum_{i=1}^Z \mathbf{I} \cdot \mathbf{p}_i, H_{e1} \right] | u_{n\alpha'} \rangle \\ &= \langle u_{n\alpha} | H_{d1} | u_{n\alpha'} \rangle - \frac{d}{Z} \sum_{i=1}^Z \langle u_{n\alpha} | \mathbf{I} \cdot \nabla_i \Phi(\mathbf{r}_i) | u_{n\alpha'} \rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Les deux termes de (12) sont égaux et opposés. Le 1^{er} correspond à l'effet Stark linéaire du moment dipolaire $d\mathbf{I}$, le 2^e à l'effet Stark linéaire du moment induit dans l'atmosphère électronique, qui est donc égal et opposé au précédent. L'effet linéaire reste donc nul. Cette conclusion n'est valable que dans une approximation non relativiste où l'on néglige le couplage spin-orbite. Des études sont en cours pour évaluer l'ordre de grandeur des effets linéaires qui pourraient subsister si l'on en tient compte.

Lettre reçue le 4 juin 1959.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] SMITH (J. H.), PURCELL (E. M.) et RAMSEY (N. F.), *Phys. Rev.*, 1957, **108**, 120.
- [2] FEINBERG (G.), *Phys. Rev.*, 1958, **112**, 1637. SALPETER (E. E.), *Phys. Rev.*, 1958, **112**, 1642. STERNHEIMER (R. M.), *Phys. Rev.*, 1959, **113**, 828.
- [3] ARDITI (M.) et CARVER (T. R.), *Phys. Rev.*, 1958, **109**, 1012 ; 1958, **112**, 449. BEATY (E. C.), BENDER (P. L.) et CHI (A. R.), *Phys. Rev.*, 1958, **112**, 450 ; *Phys. Rev. Lett.* 1958, **1**, 311. CAGNAC (B.), Communication privée.