

ANNEXES

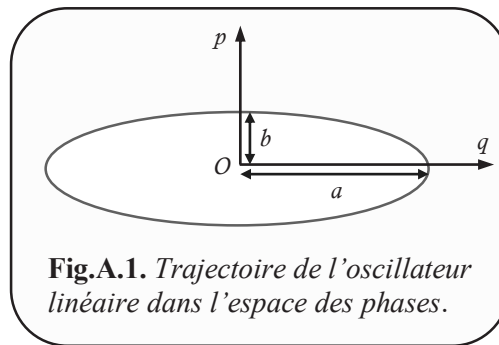
A.1. CONDITION DE QUANTIFICATION DE PLANCK DE L'OSCILLATEUR HARMONIQUE LINÉAIRE

A.1.1. Trajectoire de l'oscillateur linéaire de Planck

Au paragraphe III.1, nous avons vu que la condition de quantification de Bohr – Sommerfeld du moment cinétique est analogue à la condition de quantification de Planck (III.1.1) de l'oscillateur harmonique linéaire dans l'espace des phases. Nous nous proposons dans cette annexe de démontrer la relation (III.1.1).

En mécanique classique, l'espace des phases est formé par des points dont les coordonnées sont les positions q et les impulsions p de l'ensemble des particules du système considéré.

Dans l'espace des phases, la trajectoire de l'oscillateur linéaire de Planck est une ellipse comme l'indique la figure A.1.



Précisons les expressions correspondant à l'équation et à l'aire d'une ellipse de demi-grand axe a suivant Oy et de demi-petit axe b suivant Oz dans l'espace cartésien :

$$\frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1 ; \oint z dy = \pi ab . \quad (\text{A.1.1})$$

Considérons alors un oscillateur classique d'élongation y constitué d'un système {solide-ressort} supposé conservatif. On désigne par m la masse du solide et par k la constante de raideur du ressort.

L'énergie mécanique d'un tel oscillateur s'écrit :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}ky^2. \quad (\text{A.1.2})$$

Exprimons par la suite l'énergie mécanique de l'oscillateur harmonique linéaire dans l'espace des phases. Pour cela, il suffit de substituer dans (A.1.2) y par la coordonnée généralisée q et de remplacer la vitesse v par p/m . On obtient alors :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2. \quad (\text{A.1.3})$$

L'équation (A.1.3) peut se mettre sous la forme de l'équation d'une ellipse en la divisant par E :

$$1 = \frac{p^2}{2mE} + \frac{1}{2E}kq^2.$$

C'est-à-dire :

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/k} = 1. \quad (\text{A.1.4})$$

L'équation (A.1.4) est bien celle d'une ellipse à condition de poser :

$$a = \sqrt{2E/k} ; b = \sqrt{2mE}. \quad (\text{A.1.5})$$

Les expressions (A.1.5) montrent que dans l'espace des phases, le demi-petit axe b et le demi-grand axe a sont déterminés par l'énergie E de l'oscillateur linéaire.

A.1.2. Condition de quantification de Planck

Pour établir la condition de quantification de Planck, déterminons l'aire de l'ellipse dans l'espace des phases. Pour cela, considérons la deuxième équation (A.1.1) en y substituant les coordonnées cartésiennes y et z respectivement par q et p et en tenant compte de (A.1.5). On obtient :

$$\oint p dq = \pi ab.$$

Ce qui donne alors :

$$\oint p dq = 2\pi E \sqrt{m/k} . \quad (\text{A.1.6})$$

Pour l'oscillateur linéaire classique, la pulsation ω et la fréquence ν des oscillations sont données par les relations :

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} ; \nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} . \quad (\text{A.1.7})$$

En utilisant (A.1.7), la dernière relation (A.1.6) se met sous la forme :

$$\oint p dq = \frac{E}{\nu} . \quad (\text{A.1.8})$$

La relation (A.1.8) montre bien que l'aire de l'ellipse dans l'espace des phases, est déterminée par le rapport de l'énergie E sur la fréquence ν de l'oscillateur linéaire. Passons maintenant à l'établissement de la condition de quantification de Planck de l'oscillateur harmonique linéaire.

En vertu de la théorie des quanta, l'énergie de l'oscillateur quantique $E = nh\nu$. Ce qui donne $E/\nu = nh$. La condition de quantification de Planck de l'oscillateur linéaire s'écrit alors d'après (A.1.8) :

$$\oint p dq = nh .$$

Ce qui correspond bien au résultat (III.1.1.).

Remarque

Il faudra garder à l'esprit que l'énergie de l'oscillateur quantique à une dimension n'est pas égale à $nh\nu$. En fait, l'expression exacte de cette énergie est :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right) . \quad (\text{A.1.9})$$

D'après la relation (A.1.9), l'énergie d'oscillation du vide photonique ($n = 0$) dans l'enceinte du corps noir est $E_0 = h\nu/2$. L'énergie de l'oscillateur linéaire de Planck est donc égale à :

$$E = E_n - E_0 = nh\nu . \quad (\text{A.1.10})$$

A.2. INTERPRÉTATION DES TERMES DE L'HAMILTONIEN DE STRUCTURE FINE

A.2.1. Origines physiques

Au paragraphe III.3 du chapitre III, nous avons déterminé l'expression (III.3.16) de l'Hamiltonien de structure fine W_{sf} des systèmes hydrogénoïdes dans le domaine faiblement relativiste.

Rappelons tout d'abord l'expression de l'Hamiltonien W_{sf} qui sera largement utilisée dans cette section :

$$W_{sf} = -\frac{\vec{P}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(\vec{R})}{dR} \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V(\vec{R}) + (\dots).$$

Nous nous proposons dans ce qui suit d'expliquer l'origine physique de chacun des trois termes dans le développement ci-dessus.

- **Origine du premier terme**

L'énergie totale relativiste est donnée par l'expression (III.3.1) que nous réécrivons sous la forme suivante (sachant que mc a la dimension d'une impulsion) :

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 = m^2 c^4 \left\{ 1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 \right\}.$$

C'est-à-dire :

$$E = mc^2 \left\{ 1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 \right\}^{1/2}. \quad (\text{A.2.1})$$

Rappelons le développement binomial de la fonction $f(x) = (1+x)^n$ pour $x \ll 1$:

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!} x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!} x^3 + \dots \quad (\text{A.2.2})$$

Faisons alors un développement limité du membre de droite de la relation (A.2.1) en puissance de $\frac{\vec{p}}{mc}$ à l'approximation d'ordre 2 en mettant à profit (A.2.2).

On obtient :

$$E = mc^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^4 + \dots \right\}.$$

Soit :

$$E = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad (\text{A.2.3})$$

Sachant que l'énergie cinétique relativiste est $E_c = E - mc^2$, l'opérateur \hat{T} associé à l'énergie cinétique s'écrit d'après (A.2.3) :

$$\hat{T} = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\vec{P}^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad (\text{A.2.4})$$

Le deuxième terme dans la relation (A.2.4) correspond bien à l'expression (III.3.17) du terme W_{mv} de l'Hamiltonien de structure fine (III.3.16). Par conséquent, W_{mv} représente bien la correction à l'énergie cinétique due à la variation de la masse de l'électron avec la vitesse.

- **Origine du deuxième terme**

Dans le cas des systèmes hydrogénoïdes, la principale interaction est la répulsion coulombienne entre l'électron et le noyau. Cependant, comme nous l'avons vu au sous-paragraphe II.5.2 du chapitre II, du fait du mouvement orbital des électrons, il apparaît aussi une interaction supplémentaire déterminée par le spin de l'électron et la charge nucléaire appelée interaction spin-orbite.

Illustrons de plus près cette notion dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène. Lisons alors un référentiel à l'électron en mouvement autour du proton à la distance r avec la vitesse \vec{v} . Par rapport à ce référentiel où l'électron est au repos, le proton est en mouvement et crée à l'emplacement de l'électron un champ magnétique interne \vec{B}_0 . Ce champ exerce alors son action sur le moment magnétique de spin \vec{M}_s de l'électron. En vertu de la loi de Biot et Savart, le champ magnétique \vec{B}_0 s'exprime par la relation (voir remarque 1 à la fin du paragraphe pour la démonstration) :

$$\vec{B}_0 = -\frac{e}{c} \frac{\vec{v} \wedge \vec{r}}{r^3}. \quad (\text{A.2.5})$$

Notons que dans la relation (A.2.5), la charge e est exprimée en uemcgs (unité électromagnétique centimètre gramme seconde). Ce qui justifie le rapport : $e = e/c$. On a ainsi remplacé e en SI par e/c où la charge e est exprimée en uemcgs. Ceci sera mieux compris lors de la démonstration de la relation (A.2.5).

En outre, le moment magnétique intrinsèque de l'électron est donné par la relation (I.2.10) que nous exprimons en uemcgs (le rapport gyromagnétique $\gamma = -e/2mc$) :

$$\vec{M}_s = g\gamma \vec{s} = -g \frac{e}{2mc} \vec{s}. \quad (\text{A.2.6})$$

L'énergie potentielle d'interaction du champ magnétique (A.2.5) et du moment magnétique de spin (A.2.6) est donnée par la relation :

$$W = -\vec{M}_s \cdot \vec{B}_0 = -g \frac{e}{2mc} \left(\frac{e}{c} \frac{\vec{v} \wedge \vec{r}}{r^3} \right) \cdot \vec{s}. \quad (\text{A.2.7})$$

Introduisons le moment cinétique de l'électron (I.3.3) dans (A.2.7). On obtient :

$$W = -\frac{e^2}{m^2 c^2} \left(\frac{m\vec{v} \wedge \vec{r}}{r^3} \right) \cdot \vec{s} = \frac{e^2}{m^2 c^2} \left(\frac{\vec{r} \wedge m\vec{v}}{r^3} \right) \cdot \vec{s}.$$

C'est-à-dire :

$$W = \frac{e^2}{m^2 c^2} \left(\frac{\vec{r} \wedge \vec{p}}{r^3} \right) \cdot \vec{s} = \frac{e^2}{m^2 c^2 r^3} \vec{l} \cdot \vec{s}. \quad (\text{A.2.8})$$

Par ailleurs, en considérant l'énergie potentielle d'interaction du système {proton-électron}, il vient :

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \Rightarrow \frac{dV(r)}{dr} = \frac{e^2}{r^2}. \quad (\text{A.2.9})$$

En tenant compte de (A.2.9), l'énergie potentielle (A.2.8) s'écrit :

$$W = \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{l} \cdot \vec{s}. \quad (\text{A.2.10})$$

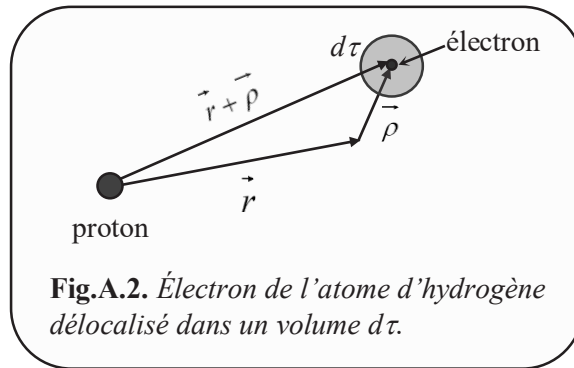
L'observable associée à l'énergie potentielle (A.2.10) est donnée par la relation :

$$\hat{W} = \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (\text{A.2.11})$$

On retrouve bien à un facteur 1/2 près, l'expression (III.3.18) de W_{SO} traduisant bien l'interaction spin-orbite assimilée formellement à une interaction entre le moment magnétique orbital et le moment magnétique de spin de l'électron. Le facteur 1/2 dans l'expression (III.3.18) est une correction introduite en tenant compte de la *précession de Thomas* résultant du fait que le mouvement de l'électron autour du proton n'est pas circulaire uniforme (voir remarque 2 à la fin du paragraphe).

- **Origine du troisième terme**

Le proton n'étant pas ponctuel, l'électron est en réalité délocalisé dans une sphère de volume $d\tau$ de rayon de l'ordre de la longueur d'onde de Compton $\lambda_c = \hbar/mc$ autour de sa position moyenne située à la distance r du proton (fig.A.2). Du fait de cette délocalisation, on décrit le potentiel d'interaction proton-électron en tenant compte du fait que l'électron n'est plus situé à r fixe mais plutôt à $r + \rho$.



Le potentiel « ressenti » par l'électron n'est plus du type coulombien $V(r) = -e^2/r$. Il est de la forme :

$$V(r + \rho) = -\frac{e^2}{(r + \rho)} = -\frac{e^2}{r(1 + \rho/r)}. \quad (\text{A.2.12})$$

Puisque $r \gg \rho$, le développement limité de $V(r + \rho)$ au premier ordre donne :

$$V(r + \rho) = V(r) + \rho \frac{dV(r)}{dr} + \dots \quad (\text{A.2.13})$$

Le terme du premier ordre dans le développement (A.2.13) est dû à la délocalisation de l'électron. Il se rajoute comme une perturbation à l'Hamiltonien non relativiste H_0 . Le calcul conduit à l'expression du terme de Darwin (Zoubeida, 2016) :

$$H_d = \frac{1}{8} \tilde{\lambda}_c^2 \Delta V(r) = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta V(r). \quad (\text{A.2.14})$$

A.2.2. Ordres de grandeur

• Terme relatif à la variation de la masse avec la vitesse

Pour estimer l'ordre de grandeur du terme relatif à la variation de la masse de l'électron avec la vitesse, il suffit de calculer le rapport W_{mv}/E_c avec E_c l'énergie cinétique non relativiste. En utilisant la relation (A.2.4) où les opérateurs sont remplacés par les grandeurs physiques associées, on obtient :

$$\frac{W_{mv}}{E_c} = \left(\frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2} \right) / \left(\frac{\vec{p}}{2m} \right) = \frac{\vec{p}^2}{8m^3 c^2}. \quad (\text{A.2.15})$$

Faisons intervenir dans le rapport (A.2.15), l'expression de l'énergie cinétique classique. Il vient

$$\frac{W_{mv}}{E_c} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{m^2 c^2} \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (\text{A.2.16})$$

Sachant que l'énergie cinétique est égale à l'opposé de l'énergie totale de l'atome d'hydrogène (III.2.1), on obtient pour l'état fondamental²³ :

$$E_c = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -E_1 = \frac{\alpha^2 m c^2}{2}. \quad (\text{A.2.17})$$

En utilisant (A.2.17), le rapport (A.2.16) s'écrit :

$$\frac{W_{mv}}{E_c} \approx \frac{1}{4} \alpha^2. \quad (\text{A.2.18})$$

²³ Il s'agit d'estimer un ordre de grandeur. Nous considérons le cas particulier de l'état fondamental pour lequel d'ailleurs l'énergie cinétique de l'électron est maximale.