

Table des matières

Introduction	3
1 <i>Le Moment Électrique Dipolaire EDM</i>	6
1.1 Introduction	7
1.2 Classification des symétries :	7
1.2.1 Les symétries internes :	8
1.2.2 Les symétries d'espace-temps :	8
1.3 Définition des symétries discrètes d'espace-temps C , P et T :	8
1.3.1 La parité P :	9
1.3.2 Le renversement du temps T :	9
1.3.3 La conjugaison de charge C :	9
1.4 Représentation des opérateurs C , P et T :	10
1.4.1 La parité :	12
1.4.2 La conjugaison de charge :	13
1.5 La symétrie CP :	14
1.6 La symétrie CPT :	14
1.7 Le Théorème CPT :	15
1.8 La violation des symétries discrètes :	16
1.8.1 La violation de P :	16
1.8.2 La violation de C :	16

1.8.3	La violation CP :	17
1.8.4	La violation T :	17
1.9	Le Moment Electrique Dipolaire de l'électron et la violation des symétries	
	Parité P et renversement du temps T :	18
1.9.1	Direction de d_e	20
1.10	Importance du moment électrique dipolaire dans La physique des particules :	20
1.11	Expériences du moment électrique dipolaire sur des ions :	21
2	<i>L'équation de Schrödinger pour une particule chargée dans un champ de Coulomb</i>	25
2.1	Introduction	26
2.2	Construction de l'équation de Schrödinger :	26
2.3	L'équation de Schrödinger pour une particule chargée dans un champ de Coulomb :	29
2.3.1	Etude de l'équation radiale :	31
2.3.2	Niveaux d'energie :	34
2.3.3	Fonction d'onde :	34
2.3.4	Facteur de normalisation	37
2.3.5	Fonction angulaire(partie angulaire) :	38
3	<i>Etude de l'effet du Moment Electrique Dipolaire d'un électron dans le cas non relativiste</i>	41
3.1	Introduction	42
3.2	Le moment électrique dipolaire intrinsèque d'un électron dans un atome d'hydrogène :	42
3.3	L'équation de Schrödinger pour un électron possédant un moment électrique dipolaire dans un atome d'hydrogène :	42
3.3.1	Equation de Schrodinger et séparation des états de parité différente	43
3.3.2	Les valeurs propres (niveaux d'energie) :	52

3.3.3	les vecteurs propres :	53
3.3.4	Facteur de normalisation $N_{n,J,S_{\pm}}$	53
4	<i>Le moment électrique dipolaire d'un électron dans le cas relativiste</i>	57
4.1	Introduction :	58
4.2	Théorème de Schiff :	58
4.3	Le lagrangien de l'interaction d'un moment électrique dipolaire avec un champ électromagnétique :	60
4.4	Les effets relativistes :	62
4.4.1	L'équation de Dirac pour un atome dans un champ électrique ex- terieur :	63
	conclusion	64
	Annexes	66
4.5	Fonction de Legendre :	66
4.6	L'effet de Lamb shift :	67
4.7	La structure fine :	68
	Bibliographie	70

Introduction :

Le système physique étudié ne peut pas dépendre d'un certain paramètre quantitatif. Pour étudier cette propriété, on considère la transformation qui modifie la valeur de ce paramètre. Lorsque le système est invariant par rapport à cette transformation, on parle de symétrie. On dit qu'une transformation réalise une symétrie si, une fois la transformation appliquée au processus physique, la loi du mouvement reste inchangée. On peut en considérer deux classes, soient les symétries continues et discrètes, déterminées par les valeurs que peuvent prendre le paramètre. Pour ce travail, nous allons traiter le moment électrique dipolaire dont il dépend de la deuxième classe des symétries, pour laquelle il ne peut y avoir que des valeurs discrètes. Plus précisément, il y a trois symétries très importantes en physique des particules, soient les symétries de parité P , de conjugaison de charge C et de renversement du temps T , ainsi que trois de leurs combinaisons qui sont d'un intérêt fondamental, les symétries CPT , CP et PT . Nous allons d'abord introduire les notions mathématiques nécessaires au traitement des symétries étudiées, puis nous allons présenter chacune des trois symétries de base P , C et T , leur importance en physique, leurs vérifications expérimentales et leurs violations. Par la suite, nous allons présenter le théorème de la symétrie CPT .

Dans la nature un des phénomène physique qui viole la symétrie, le moment électrique dipolaire EDM , l'existence de ce dernier implique la violation des symétrie T et P comme nous allons l'expliquer dans le premier chapitre, les recherches experimentales pour une valeur non-nul du moment électrique dipolaire d'une particule fondamentale ont été lancées depuis près de 50 ans, toutes les experiences effectuées ont mesuré des valeurs de EDM très petites mais non nul est par consequence c'est la preuve de la violation de renversement du temps T et la parité P , EDM est le signe évident de la physique au delà du modele standard SM la prédiction du SM pour cette quantité physique est $d_e \simeq 10^{-40} e \cdot cm$ cette grandeur est plus petite que les limites exprimentales cependant, il y a des bonnes raisons : le EDM non-nul peut être mesurée par plusieurs extensions du SM comme le Modèle Standard supersymétrique ($SUSY$) qui a prédit une

valeur pour l'*EDM* plus proche aux limite expérimentales $1,6 \times 10^{-27} e \cdot cm$.

La plupart des recherches sont orientées vers la mesure d'un *EDM* pour des particules élémentaires soit le neutron ou l'électron, il y a aussi des mesures pour le proton et le muon, dans ce travail nous allons traiter le moment électrique dipolaire d'un électron dans un atome d'hydrogène, nous allons effectuer une étude détaillée sur l'interaction du moment électrique dipolaire de l'électron avec le champ coulombien de l'atome de l'hydrogène, cette interaction qui se manifeste dans l'hamiltonien et affect les niveau des énergies et leurs fonctions propres de l'équation de Schrodinger pour l'atome de l'hydrogène dans le cas non-relativist, la solution de l'équation de Schrodinger exige une valeur très petite du *EDM*.

Notre travail est organisé en quatre chapitre dans le premier chapitre nous allons exposé un rappel sur les symetries discrètes, leurs formalisme en théorie des champs et la vilation de chaque symétrie avec l'explication de l'importance du théorème du CPT, puis on a exposé l'essentiel de ce travail : le moment électrique dipolaire *EDM* leur importance, sa relation avec la violation des symétries de la parité et le renversement du temps, nous allons exposé aussi quelques expériences sur la mesure de la valeur du *EDM*

Dans le 2^{ème} chapitre nous allons exposé la methode de la résolution de l'équation de Schrodinger de l'atome de l'hydrogène pour un champ coulombien on calcule les vecteurs et les valeurs propre de l'hamiltonien du systeme.

Dans le 3^{ème} chapitre on employe les solutions de l'équation de Schrodinger obtenus dans le chapitre précédent, pour résoudre l'équation de Schrodinger pour un électron non relativiste avec un moment électrique dipolaire dans un atome d'hydrogène, nous allons étudier l'intéraction du EDM avec le champ coulombien et leur effet sur les niveau des énergies et leurs fonction propres.

Dans le 4^{ème} chapitre on expose l'importance des effets relativiste dans le calcule et la mesure du moment électrique dipolaire, on expose le théorème de Schiff on démontre la non validité de ce théorème dans le cas relativiste lors de l'utilisation de l'equation de Dirac, et finalement nous allons discuter nos résultats et on tire notre conclusion.

Chapitre 1

Le Moment Électrique Dipolaire

EDM

1.1 Introduction

On dit qu'une transformation réalise une symétrie si, une fois la transformation appliquée au processus physique, la loi du mouvement reste inchangée. La notion de symétrie est transformée en un concept important de la physique moderne. Les symétries permettent de classer les objets physiques ou d'imposer des règles de sélection dans les réactions physiques. la dynamique et les théories actuelles sont bâties sur le principe de symétrie. Ce chapitre est consacré en particulier aux symétries discrètes ainsi qu'à l'invariance des lois de la Physique des particules par ces symétries en étudiant la violation de chaque symétries et puis l'essentielle de ce sujet le moment électrique dipolaire et sa relation avec la violation des symétries parité et renversement du temps.

1.2 Classification des symétries :

Il existe deux types de symétries en Physique des Particules, une distinction peut être faite à partir d'un critère d'ordre mathématique :[1]

Symétrie discrète : On dit qu'une symétrie est discrète si l'ensemble des actions qu'elle réalise est fini.

Symétrie continue : Pour une symétrie continue, les transformations peuvent être considérées comme une somme de transformations infinitésimales. Les symétries continues possèdent une particularité : elles réalisent l'objet d'un théorème mathématique dû à Emmy Noether [2]. Valide aussi bien en Physique classique qu'en Physique quantique, ce théorème fondamental associe à toute invariance par une symétrie continue la conservation d'une quantité physique, que l'on appelle charge. Les Lois de conservation qui en découlent sont important en Physique.

En théorie quantique des champs, on peut différencier les symétries selon un autre

critère :

Symétrie interne et symétrie d'espace-temps (ou externe).

1.2.1 Les symétries internes :

Sont intrinsèques à la structure des champs. On peut distinguer les symétries globales qui ne dépendent pas de l'espace, des symétries locales (Ou de jauge) qui dépendent du point de l'espace considéré. Par exemple, le groupe $U(1)_\nu$ est une symétrie globale .

1.2.2 Les symétries d'espace-temps :

Affectent les coordonnées de temps et d'espace. En particulier, l'invariance par le groupe de Poincaré est le point de départ de la théorie quantique des champs , dans ce formalisme, les particules sont décrites par les représentations irréductibles de ce groupe, qui sont caractérisées par deux invariants : la masse et le spin. De plus, le groupe de Poincaré comporte des transformations continues telles que les transformations spéciales de Lorentz, les translations dans le temps et dans l'espace, les rotations dans l'espace. L'application du théorème de Noether permet d'obtenir les résultats classiques : conservation de l'énergie, de l'impulsion et du moment cinétique. Parmi les symétries d'espace-temps, il existe également des transformations discrètes, la suite de ce chapitre est consacrée à leur étude.

1.3 Définition des symétries discrètes d'espace-temps

C , P et T :

On peut définir trois transformations élémentaires discrètes [3] [4] [5] [6], symétries de l'espace-temps :

1.3.1 La parité P :

La parité P transforme le vecteur position ;

$$(\vec{x}) \text{ en } (-\vec{x})$$

Elle peut être vue comme la composition d'une réflexion par rapport à un plan suivie d'une rotation de 180° par rapport à un axe perpendiculaire à ce plan. C'est la première transformation qui représente le caractère discret de la parité. Dans les illustrations, la parité P est souvent représentée par un miroir.

1.3.2 Le renversement du temps T :

Le renversement du temps T renverse le sens du temps, qui échange les rôles des cônes de lumière futur et passé.

(t) en $(-t)$, Et permute les états initiaux et finaux

1.3.3 La conjugaison de charge C :

La conjugaison de la charge C transforme une particule en son antiparticule. Cela implique un inversement du signe du nombre baryonique et des charges quantiques :

$$C : \{\text{particules}\} \Rightarrow \{\text{antiparticules}\}$$

Charge électrique, étrangeté (*Strange*), charme (*Charm*), beauté (*beauty*), sommet (*top*).

Les transformations P et T font formellement partie du groupe de Poincaré. Le résultat de l'application de P et de T sur les grandeurs cinématiques usuelles est donné par le tableau 1, La transformation de conjugaison de charge C est propre à la Physique subatomique. Bien que selon la définition elle agisse sur les charges quantiques, elle fait partie des symétries d'espace-temps. En effet, une particule peut être représentée par une fonction d'onde d'énergie positive. L'antiparticule est une solution d'énergie négative

et, selon Feynman, peut être vue comme une particule qui remonte le temps. Ainsi, la Transformation C agit sur les composantes Spatio-temporelles de la fonction d'onde.

	P	T
temps t	t	$-t$
vecteur position \vec{x}	$-\vec{x}$	\vec{x}
impulsion \vec{p}	$-\vec{p}$	$-\vec{p}$
moment cinétique orbital \vec{L}	\vec{L}	$-\vec{L}$
spin \vec{S}	\vec{S}	$-\vec{S}$

(1.1)

Table1 : Effet des transformations P et T sur les grandeurs cinématiques usuelles

Remarque : A partir de ces trois symétries élémentaires, il est possible de définir des symétries composées : TC, CP, PT, CPT . Les autres sont aussi possibles car C, P et T commutent entre eux. Les symétries élémentaires et composées forment selon Wigner les 7 miroirs de la Physique. La nature peut respecter ces miroirs ou ces derniers peuvent être brisés [7].

1.4 Représentation des opérateurs C, P et T :

Les symétries C et P sont représentées par des opérateurs unitaires alors que la symétrie T est représentée par un opérateur antiunitaire. Ce résultat peut être montré en théorie quantique des champs en appliquant les transformations discrètes aux différentes lois du mouvement et aux relations de commutation canoniques à temps égaux. Pour simplifier, on explique la particularité de l'opérateur T dans l'exemple simple de l'équation de Schrödinger de la mécanique quantique non relativiste [8] [3].

$$(\iota\hbar d/dt) | \Psi(t) \rangle = H | \Psi(t) \rangle \quad (1.2)$$

En pose que l'Hamiltonien H est hermétique. Si on applique le renversement du temps T , la variable temporelle t devient $-t$ L'équation obtenue rapporte de l'équation de Schrödinger d'origine par la présence d'un signe moins dans le terme de gauche

$$(-i\hbar d/dt) | \Psi(-t) \rangle = H | \Psi(-t) \rangle \quad (1.3)$$

Pour revenir à la forme désirée de l'équation, nous devons prendre le conjugué complexe de l'équation. Comme l'Hamiltonien H est réel, $H^* = H$:

$$(-i\hbar d/dt) | \Psi^*(-t) \rangle = H | \Psi^*(-t) \rangle \quad (1.4)$$

En concerne les symétries discrètes ; la distinction entre opérateur unitaire et antiunitaire se manifeste lorsque l'on s'intéresse aux valeurs propres de ces opérateurs [6] :

La conjugaison de charge

$$C | \mathcal{L}(\vec{p}, \vec{s}) \rangle = \eta_C | \mathcal{L}^C(\vec{p}, -\vec{s}) \rangle \quad (1.5)$$

La parité

$$P | \mathcal{L}(\vec{p}, \vec{s}) \rangle = \eta_P | \mathcal{L}^P(-\vec{p}, \vec{s}) \rangle \quad (1.6)$$

Le renversement de temps

$$T | \mathcal{L}(\vec{p}, \vec{s}) \rangle = \eta_T | \mathcal{L}^T(-\vec{p}, -\vec{s}) \rangle \quad (1.7)$$

Les valeurs propres obtenues sont des facteurs de phase

Pour les opérateurs η_P et η_C , C et P sont respectivement la parité intrinsèque et la conjugaison de charge intrinsèque (ou parité de charge) de la particule. Ces nombres sont mesurables, caractéristiques de la particule et généralement donnés par J^{PC} avec J le spin, P la parité et C la conjugaison de charge. Si les symétries C et P sont conservées au cours d'une réaction, les états initiaux et finaux devraient avoir la même parité globale

et même conjugaison de charge globale.

Dans ce qui suit on represent les formalismes des operateurs on theorie des champs ;

1.4.1 La parité :

U_p : opérateur unitaire, dont il suffit de connaître l'action sur les opérateurs de création et d'annihilation

pour le champ scalaire :

$$U_p \hat{\phi}(t, \vec{x}) U_p^+ = \eta_\phi \hat{\phi}(t, -\vec{x})$$

Avec

$$\eta_\phi = \pm 1$$

Si

$$\eta_\phi = +1 \Rightarrow U_p \hat{\phi}(t, \vec{x}) U_p^+ = \hat{\phi}(t, -\vec{x})$$

Le champ est véritablement scalaire

Si

$$\eta_\phi = -1 \Rightarrow U_p \hat{\phi}(t, \vec{x}) U_p^+ = -\hat{\phi}(t, -\vec{x})$$

Le champ est pseudo-scalaire.

pour le champ vectoriel :

$$U_p \hat{A}^i(t, \vec{x}) U_p^+ = -\eta_A \hat{A}^i(t, -\vec{x})$$

Avec

$$\eta_A = \pm 1$$

Si

$$\eta_\phi = +1 \Rightarrow U_p \hat{A}^i(t, \vec{x}) U_p^+ = -\hat{A}^i(t, -\vec{x})$$

pour le vecteur.

Si

$$\eta_\phi = -1 \Rightarrow U_p \hat{A}^i(t, \vec{x}) U_p^+ = \hat{A}^i(t, -\vec{x})$$

pour le pseudo-vecteur.

pour le champ spinoriel :

$$U_p \Psi(t, \vec{x}) U_p^+ = \eta_\psi \gamma^0 \Psi(t, -\vec{x})$$

1.4.2 La conjugaison de charge :

U_C : opérateur de conjugaison de charge

pour le champ scalaire :

$$U_C \hat{\phi}(x) U_C^+ = \eta_C \hat{\phi}^*(x)$$

pour le champ vectoriel :

la situation est la même.

pour le champ scalaire :

$$U_C \Psi(x) U_C^+ = \eta_C \bar{\Psi}^T(x) = \eta_C \gamma^{0T} \Psi^*(x)$$

L'invariance par les symétries unitaires P , C et CP permettent d'obtenir des règles de sélection, contrairement aux symétries antiunitaires T , PT , TC et CPT . Pendant,

la symétrie CPT se distingue des autres symétries antiunitaires grâce à un théorème formulé dans le cadre de la théorie quantique des champs.

1.5 La symétrie CP :

En physique des particules, une théorie possède la symétrie CP si elle est invariante sous une transformation simultanée de conjugaison de charge, qui échange particules et antiparticules, et une inversion d'espace. Introduite après la découverte de la violation de la parité dans certaines réactions de radioactivité, la fonction de symétrie CP inverse l'axe dans l'espace d'une particule; un électron de spin up devient un positron de spin down. Voir la figure (1);

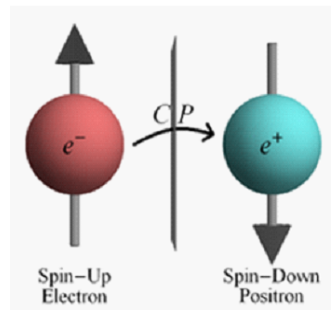


Figure 1.1 :la symtrie

CP

(1.8)

1.6 La symétrie CPT :

La symétrie CPT est une combinaison particulière des trois symétries, La transformation associée est l'opération(CPT), qui comme son nom l'indique est constituée de l'application successive de C , P et T . Autrement dit, elle change les particules en anti-particules et inverse l'espace-temps :

$$(CPT)\Psi_{\sigma}(t, \vec{x}) = (CPT)\Psi_{\sigma}(-t, -\vec{x})$$

L'ordre d'application des trois opérateurs n'a en fait aucune importance puisque ces derniers commutent entre eux. Cette transformation est composée de deux transformations unitaires et d'une antiunitaire, elle est donc antiunitaire. Contrairement aux autres symétries, la symétrie *CPT* a un support théorique très fort

1.7 Le Théorème *CPT* :

Dans le cadre de la théorie quantique des champs, le théorème *CPT* assure que la transformation composée *CPT* est la symétrie globale des lois de la Nature. L'ordre des opérations n'ayant pas d'importance, on entend aussi parler de théorème *TCP* ou *PCT*. Il a été formulé la première fois par Schwinger et Zumino en 1951. Les premières démonstrations aident à Lüders [7] et à Pauli [8] en 1954 ainsi qu'à Bell [9] en 1955. Les démonstrations du théorème ont été perfectionnées de manière à obtenir l'invariance par *CPT* sous des conditions plus larges. Une formulation contemporaine du théorème *CPT* pourrait être : la transformation *CPT* laisse invariant le lagrangien d'une théorie physique à condition que cette théorie satisfasse les hypothèses suivantes [10] :

- la localité
- l'invariance de Lorentz (associée à la causalité)
- l'herméticité (associée à l'unitarité)
- les champs vérifiant le théorème spin-statistique

Ces hypothèses sont vérifiées dans le cadre du Modèle Standard. En outre, ce théorème implique une conséquence importante en Physique des Particules [11]. Il assure que des particules *C* conjuguées ont même masse et même temps de vie. Cette propriété constitue un test de la symétrie *CPT* pour de nombreuses expériences.

A l'heure actuelle, aucune donnée expérimentale ne contredit le théorème. Pourtant, de nouvelles théories prédisent une violation de la symétrie *CPT* On notera également

que le théorème CPT ne nous informe pas sur l'invariance par les symétries élémentaires C , P et T . Ces symétries peuvent être distinctement violées.

1.8 La violation des symétries discrètes :

Les physiciens pensaient que les théories formulées étaient invariantes par C , P et T . Ce n'est qu'à partir de la moitié du XX ième siècle que fut découvert expérimentalement que l'interaction faible pouvait violer ces symétries.[12]

1.8.1 La violation de P :

Les premières observations de violation de la parité furent obtenues en En 1957, Mme Wu dans des processus impliquant des désintégrations β .



Cette désintégration montre que la parité est violée de façon maximale dans l'interaction faible.

1.8.2 La violation de C :

L'expérience de Mme Wu de désintégrations β mit également en évidence pour la première fois la violation de la conjugaison de charge. En effet, Lee, Yang et Oehme montrèrent que la large asymétrie constatée entre le nombre d'électrons d'hélicité gauche et droit n'était possible que si la violation de la P était accompagnée d'une violation de C [13] [14]. D'autres expériences, telles que la désintégration du μ^- et du μ^+ ont confirmé ensuite les conclusions de l'expérience de Mme Wu.

1.8.3 La violation CP :

Est un phénomène physique, qui est observé par les expérimentateurs dans les grands accélérateurs des particules, on prédit même qu'il est à l'origine de la création de la matière dans l'univers dans les premiers temps du *Big Bang* il est à noter que la violation de CP a été observée pour la première fois dans le cas du mélange $(k^{\circ} \bar{k}^{\circ})$ [15]

$$k^{\circ} \rightarrow \pi^{+} + \pi^{-} \rightarrow \bar{k}^{\circ}$$

Gell-Mann et Pais montrèrent que les états observés n'étaient pas les états propres de C mais une combinaison linéaire de ces derniers [16]. Pais montra que les états propres de masse étaient les mésons k_1° et k_2° définies par ;

$$|k_1^{\circ}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\{|k^{\circ}\rangle + |\bar{k}^{\circ}\rangle\} \quad CP = +1 \quad (1.10)$$

$$|k_2^{\circ}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\{|k^{\circ}\rangle - |\bar{k}^{\circ}\rangle\} \quad CP = -1 \quad (1.11)$$

Avec la convention ;

$$CP \quad |k^{\circ}\rangle = |\bar{k}^{\circ}\rangle \quad (1.12)$$

$$CP \quad |\bar{k}^{\circ}\rangle = |k^{\circ}\rangle \quad (1.13)$$

En 2001, une nouvelle génération d'expériences, l'expérience Babar et Belle au Stanford Linéaire Accelerator Center (*SLAC*) [17]

1.8.4 La violation T :

Pour tester la symétrie T , la collaboration CPLEAR mesura le paramètre de Kabîr [15] avec les kaons neutres en 1998. Ce paramètre représente l'asymétrie entre la fréquence d'oscillation du k° en \bar{k}° .

1.9 Le Moment Electrique Dipolaire de l'électron et la violation des symétries Parité P et renversement du temps T :

Pour qu'un EDM (Electric Dipole Momentum)[18] d'une particule soit non nul, il faut violer à la fois la parité et le renversement du temps. dans ce qui suit nous allons démontré comment, considérons le hamiltonien suivant representant un modèle EDM et un moment magnétique dipolaire :

$$H_{EDM} = -d \cdot \varepsilon = -d\sigma \cdot \varepsilon \quad (1.14)$$

$$H_{MDM} = -\mu \cdot B = -\mu\sigma \cdot B \quad (1.15)$$

Où

- d : est le moment dipolaire électrique
- ε : est le champ électrique
- σ : est l'opérateur de spin de Pauli
- μ : est le dipôle magnétique
- B : est le champ magnétique

Sachant que EDM est alongé le long de l'axe de la rotation de la particule.

Bien que les deux équations précédente sont très semblables, ils ont des caractéristiques très différentes sous les transformations P et T .

Si une transformation de la parité est appliquée à ces deux équations, les vecteurs axiaux σ et B restent invariants, mais le vecteur ε change le signe. Par conséquent H_{EDM} change le signe sous P , alors que H_{MDM} reste invariant.

Sous une transformation du renversement du temps, le vecteurs dépendants du temps σ et B changent le signe, mais le vecteur ε reste invariant. Encore H_{EDM} change le signe sous T , mais H_{MDM} reste invariant. Un schémas qui explique la violation du EDM par P et T est représenté dans la figure1.2

Si l'électron est imaginé pour avoir une dimension finie. La direction de μEDM est renversé sous une transformation de la parité, mais la direction de la rotation reste la même. Par conséquent, la parité est violée. Au-dessous d'une transformation du renversement du temps le contraire se passe : la direction de la rotation est renversée, mais la direction de μEDM reste la même. Donc, l'invariance du renversement du temps est violé.

Le théorème CPT déclare que sous la combinaison des transformations conjugaison charge (C), parité(P) et renversement du temps (T) l'hamiltonian reste invariant [19]

L'observation d'un EDM non nul est l'équivalent à la violation CP et T qui ont été observé dans la desintegration des *kaons* et les mésons B [20, 21] [22]. D'autre façon pour mesurer le moment électrique dipolaire est d'observer le moment électrique dipolaire moléculaire, où la condition de la violation de P , T , et CP n'est pas exigée comme dans le cas du moment électrique dipolaire d'une particule fondamentale, le moment dipolaire moléculaire n'existe que lors de l'application d'un champ électrique extérieur sur la molécule ou l'atome, si on renverse la direction du champ électrique, alors la direction du moment dipolaire se renverse aussi, dans ce scénario, aucune symétrie n'est brisé.

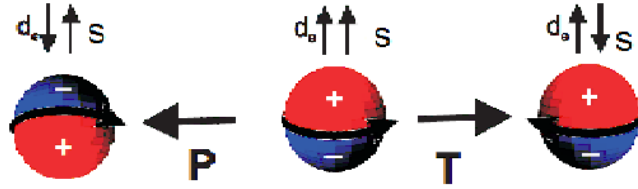


Figure 1.2 : Si un EDM existe l'orientation entre le moment électrique dipolaire (d_e), et les moment de spin (s) changeront sous la transformation de la parité (P) ou transformation renversement du temps (T).

(1.16)

(1.16)

1.9.1 Direction de d_e

Il a été démontré que le moment électrique dipolaire est parallèle à l'axe de spin $d_e \parallel S$ pour des raisons imposées par la mécanique quantique le d_e ne peut pas être perpendiculaire au spin.

1.10 Importance du moment électrique dipolaire dans La physique des particules :

Le EDM peut être présenté par un diagramme de Feynman composé au moins de quatre boucles [23]

Dans la figure 1.3 on représente un diagramme de Feynman de quatre boucles qui contribue à un EDM non nul dans le Modèle Standard

Le Modèle Standard prédit que $d_e < 10^{-40} e \cdot cm$ [24] cette valeur est beaucoup plus petite que la limite expérimentale courante [1], $1,6 \times 10^{-27} e \cdot cm$, si un EDM non nul est

défecté ça sera alors est une indication importante de la physique au delà du Modèle Standard.

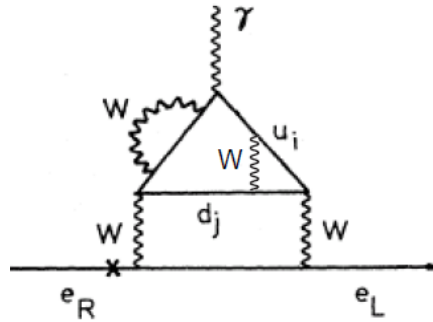


Figure 1.3 : Un exemple d'un diagramme de quatre-boucle qui contribue au moment électrique dipolaire EDM dans le SM

1.11 Expériences du moment électrique dipolaire sur des ions :

La plupart des expériences utilisent la même méthode générale pour mesurer d_e , il est difficile d'utiliser une particule libre dans la recherche du d_e parce qu'elle accélère hors la région expérimentale lors de l'application d'un champ électrique extérieur, alors dans ce but des atomes neutres ou des molécules sont utilisées, dont on étudie les électrons de la valence de ces système.

La structure interne de l'atome ou la molécule augmente et amplifie la valeur du

moment électrique dipolaire à l'intérieur du système.

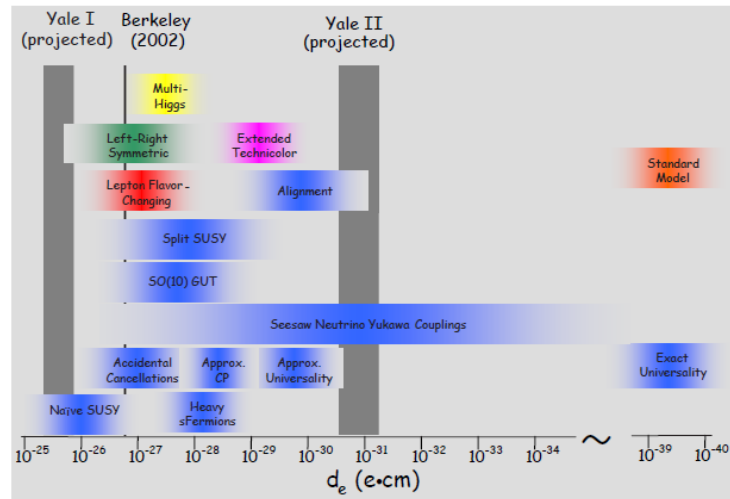


figure 1.4 : prdiction pour mesur des valeurs pour la grandeur d_e .

Les rubans colores presentent les prdictions thoriques, les rubans bleus presentent prdiction de SUSY, Les lignes noires indiquent la limite experimentale.

Le mesure la plus précise de l' EDM a été faite par Commines et ses collègues [25], cette mesure a été effectuée sur un faisceau atomique de Tl .

Particules	EDM limit (95% C.L.)	System	Prediction SM [e.cm]	New Physics limit [e.cm]
electron	1.9×10^{-27}	^{205}Tl atom	10^{-38}	10^{-27}
muon	1.05×10^{-19}	Cadre du reste E	10^{-35}	10^{-22}
tau	3.1×10^{-16}	$e^+e^- \rightarrow \tau^+\tau^-\gamma$	10^{-34}	10^{-20}
proton	6.5×10^{-23}	$^{205}\text{Tl-F}$ mol.	10^{-31}	5×10^{-26}
neutron	7.5×10^{-26}	UCN	10^{-31}	5×10^{-26}
Λ hyperon	1.5×10^{-16}	cadre du reste E	10^{-30}	5×10^{-25}
^{199}Hg	3.1×10^{-29}	^{199}Hg atom	10^{-33}	10^{-28}

Des expériences donnant des valeurs du EDM pour des différentes particules dans le Modèle Standard et au delà du Modèle Standard.

(1.17)

Dans le tableau qui suit une classification des expériences qui ont mesuré l'EDM :

Group	Type	$d_{atome} [e \cdot cm]$	Refs
Commins	TI	$(6, 9 \pm 7, 4) \times 10^{-28}$	[22]
Hunter	Cs	5×10^{-22}	[15]
Gould	Cs	5×10^{-22}	[16]
Heinzen	Cs	$(0, 8 \pm 1, 8) \times 10^{-22}$	[16]
Weiss	Cs	$(8, 1 \pm 11, 6) \times 10^{-24}$	[15]
deMille	PbO	$(-0, 2 \pm 3, 2) \times 10^{-26}$	[17]
Hinds	YbF	4×10^{-27}	[18]
Shafer-Ray	PbF	4×10^{-27}	[20]
ACME	ThO	$3, 7 \times 10^{-29}$	[17]
Leanhardt	Ga ⁺³	10^{-30}	[25]
JILA	HfF ⁺ , ThF ⁺ ,	$(4, 2 \pm 6) \times 10^{-23}$	[20]
Leanhardt	Hg	2×10^{-28}	[22]

Table 2 : Des expériences donnant des valeurs du EDM pour des différents atomes, ions et molécule dans le Modèle Standard et au delà du Modèle Standard. (1.18)

Chapitre 2

*L'équation de Schrödinger pour une
particule chargée dans un champ de
Coulomb*

2.1 Introduction

l'équation de Schrödinger est une équation différentielle de deuxième ordre par rapport la position du système et premier ordre par rapport au temps, dans ce qui suit nous allons exposer en détail les différentes étapes pour construire et résoudre une équation de Schrödinger.

2.2 Construction de l'équation de Schrödinger :

Le physicien autrichien Erwin Schrödinger utilisa les résultats de De Broglie pour établir une équation régissant l'évolution spatiale de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ d'un système physique. Pour obtenir l'équation de Schrödinger prenons la formule de l'onde plane de De Broglie[25, 26, 27]

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(k\vec{r} - \omega t)} \quad (2.1)$$

dans la suite, il sera plus intéressant de considérer la pulsation ω et le nombre d'onde k , qui d'après les postulats ci-dessus, sont liés à la particule classique par :

$$E = \hbar\omega \quad (2.2)$$

$$p = \hbar k \quad (2.3)$$

Donc ;

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i(p\vec{r} - Et)}{\hbar}} \quad (2.4)$$

On remarque alors qu'en dérivant l'onde par rapport au temps, il vient

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar}EAe^{i(k\vec{r}-\omega t)} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.5)$$

$$E\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

Alors ;

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (2.7)$$

\hat{E} : L'opérateur de l'énergie

De même, le gradient de cette fonction d'onde donne :

$$\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\vec{r}, t) = \vec{\nabla}\Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar}p\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.8)$$

$$p\Psi(\vec{r}, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.9)$$

Alors ;

$$\vec{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (2.10)$$

\hat{p} : L'opérateur d'impulsion

où

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.11)$$

pour une particule libre, et d'après la mécanique classique, l'énergie mécanique est donné par :

$$E = E_c = T = \frac{p^2}{2m} \quad (2.12)$$

cette quantité apparaît dans la formulation hamiltonienne pour une particule libre $U(r) = 0$ de la mécanique classique.

En appliquant le principe de correspondance entre les valeurs classiques et quantiques,

pour l' énergie, de l'équation (2.12) et (2.6) on obtient :

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

Et pour l'impulsion

$$\vec{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}} \quad (2.14)$$

$$\frac{p^2}{2m}\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial r})^2\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

Donc, l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.16)$$

Où :

$$\vec{\nabla}^2 = \Delta$$

C'est le Laplacien.

On peut écrire maintenant l'opérateur hamiltonien du système pour une particule libre

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (2.17)$$

En utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'écriture de l'équation de Schrödinger pour obtenir

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.18)$$

Lorsque la particule est plongée dans un potentiel scalaire indépendant de temps $U(r)$ “par exemple potentiel d'une particule chargée dans un champ Coulomb” d'après la mécanique classique, l'énergie totale du système s'écrit comme suit :

$$E = T + U(r) = \frac{p^2}{2m} + U(r) \quad (2.19)$$

Avec cette nouvelle valeur d'énergie et à partir de l'équation (2.7) et l'opérateur d'im-

pulsion \hat{p} , l'équation de Schrödinger devient :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.20)$$

Alors l'énergie totale ce n'est que l'opérateur Hamiltonien du système :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \quad (2.21)$$

En utilisant cet opérateur, on peut simplifier l'écriture de l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.22)$$

2.3 L'équation de Schrödinger pour une particule chargée dans un champ de Coulomb :

Le potentiel de Coulomb créé par un atome d'une charge $+Z$ est donné par

$$V = -\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.23)$$

donc l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H_0 = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.24)$$

alors l'équation de Schrödinger est donné par :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2.25)$$

telle que $\Psi(\vec{r})$ est la fonction d'onde du système correspondante à l'énergie totale E

Avec le potentiel de Coulomb nous sommes en présence d'un système à symétrie sphérique, nous allons employer un système des coordonnées sphériques et commençons par

la séparation des variables pour la recherche du solutione stationnaire sous la forme ;

$$\Psi(\vec{r}) \Leftrightarrow \Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2.26)$$

où encore

$$\Psi_{E,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{E,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2.27)$$

où :

$R_{E,l}(r)$: la partie radiale de la fonction d'onde

$Y_l^m(\theta, \phi)$: la partie Angulaire de la fonction d'onde, Elle represente aussi les fonction propre des operateurs L^2 et L_z pour les valeur propres $\hbar^2 l(l+1)$ et $\hbar m$ respectivement [28] [29]

Les coordonnées sphériques

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

Element de volume

$$dv = dx dy dz$$

$$dv = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

Le laplacien en coordonées sphériques :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2}$$

Tel que

$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right]$: Partie angulaire de Laplacien est le carré de l'opérateur moment Angulaire

l'équation de schrödinger s'écrit alors ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \right) - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right] R_{E,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = E R_{E,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \quad (2.28)$$

2.3.1 Etude de l'équation radiale :

Sachant que $Y_l^m(\theta, \phi)$ est une fonction propre de L^2 pour la valeur propre $\hbar^2 l(l+1)$, l'équation radiale s'écrit sous la forme ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right] R_{E,l}(r) = ER_{E,l}(r) \quad (2.29)$$

Nous cherchons des solutions de la forme

$$U_{E,l}(r) = rR_{E,l}(r) \quad (2.30)$$

Maintenant cherchons de $U_{E,l}(r)$ en substituant (2.30) dans (2.29)

$$\frac{d^2 U_{E,l}(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{eff}(r)] U_{E,l}(r) = 0 \quad (2.31)$$

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (2.32)$$

$V_{eff}(r)$ est le potentiel effectif (coulombien+barrière centrifuge)

Introduisons les quantités :

$$\rho = \left(-\frac{8mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot r \quad (2.33)$$

$$\zeta = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(-\frac{m}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.34)$$

Où $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar C} = \frac{1}{137}$: est la constante de la structure fine

avec ; $E < 0$ Ainsi l'équation(2.31) devient ;

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\zeta}{\rho} - \frac{1}{4} \right] U_{E,l}(\rho) = 0 \quad (2.35)$$

Comportement asymptotique à la l'infinie :

$$\rho \rightarrow \infty \quad ; \quad \frac{l(l+1)}{\rho^2} \rightarrow 0 \quad \text{et} \quad \frac{\zeta}{\rho} \rightarrow 0 \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right) U_{E,l}(\rho) = 0$$

la solution

$$U_{E,l}(\rho) = Cste \exp\left(\pm \frac{1}{2}\rho\right) \quad (2.36)$$

La solution $\exp\left(+\frac{1}{2}\rho\right)$ est rejetée ($\rightarrow \infty$)

Alors la solution acceptée est

$$U_{E,l}(\rho) = Cste \exp\left(-\frac{1}{2}\rho\right) \quad (2.37)$$

La solution generale de (2.35) sera se la forme ;

$$U_{E,l}(\rho) = \exp\left(-\frac{1}{2}\rho\right) f(\rho) \quad (2.38)$$

Où

$$f(\rho) = f_{E,l}(\rho)$$

En injectant (2.38) dans (2.35)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\zeta}{\rho} - \frac{d}{d\rho} \right] f_{E,l}(\rho) = 0 \quad (2.39)$$

Ecrivons $f_{E,l}(\rho)$ sous la forme d'une serie de puissances :

$$f(\rho) = \rho^{l+1} g(\rho) \quad (2.40)$$

Avec

$$g(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k, \quad C_0 \neq 0 \quad (2.41)$$

Justification de la forme de la solution :

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R_{E,l}(r) = 0 \quad (2.42)$$

Comme le cas du potontiel coulombien $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$

Considerons l'équation radiale precedente au voisinage de "0" est introduisons la so-

lution R_0 telle que ;

$$\left[\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - l(l+1) \right] R_0(r) = 0 \quad (2.43)$$

$$R_0(r) = \alpha r^p \quad (2.44)$$

cette solution injectée dans l'équation précédente tel que

$$\left\{ \begin{array}{l} p = l \\ \text{ou} \\ p = -(l+1) \end{array} \right. \quad (2.45)$$

le cas $p = -(l+1)$ est rejetée car $r \rightarrow 0; R_0 \rightarrow \infty$

Donc

$$R_0(r) = \alpha r^l \quad (2.46)$$

Alors

$$U_{E,l}(r) = \alpha r^{l+1} \quad (2.47)$$

En substituant (2.40) dans (2.39) , la fonction $g(\rho)$ vérifie l'équation différentielle

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{d}{d\rho} + (\rho-l-1) \right] g(\rho) = 0 \quad (2.48)$$

Et en remplaçant $g(\rho)$ par l'expression (2.41)

$$\sum_{k=0}^{\infty} [k(k-1)c_k \rho^{k-1} + (2l+2-\rho)k c_k \rho^{k-1} + (\zeta-l-1)c_k \rho^k] = 0 \quad (2.49)$$

Cette série est identiquement nulle si tous les coefficients sont nuls en particulier les coefficients de ρ^k

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ [k(k+1) + (2l+2)(k+1)] c_{k+1} + (\zeta-l-1-k)c_k \} \rho^k = 0 \quad (2.50)$$

D'où

$$c_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \zeta}{(k + 1)(2l + 2 + k)} \quad (2.51)$$

cette expression permet de générer tous les coefficients de la série connaissant c_0 ce qui justifie la condition $c_0 \neq 0$

La série de puissance donnée par l'expression (2.41) doit comporter un nombre fini de termes

Soit n_r de degré de ρ le plus élevée

donc $c_{n_r} \rho^{n_r}$ est le dernier terme du polynôme

Alors

$$n_r + l + 1 - \zeta = 0$$

où

$$\zeta = n_r + l + 1 = n \quad (2.52)$$

Tel que

n : nombre quantique principale

n_r : nombre quantique radiale

2.3.2 Niveaux d'énergie :

on reprend l'expression

$$\zeta = z\alpha \left(-\frac{mc^2}{2E} \right)^{\frac{1}{2}}$$

en utilisant l'expression (2.52) on déduit les niveaux d'énergie de l'atome les quelles s'écrivent :

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \quad (2.53)$$

2.3.3 Fonction d'onde :

• La fonction radiale : (partie radiale)

La fonction $g(\rho)$ (2.41)¹ peut être déduite en utilisant les polynôme de *Laguerre* défini par

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (\rho^q e^{-\rho}) \quad (2.54)$$

ce polynôme peut être calculé de la fonction génératrice suivante

$$\begin{aligned} U(\rho, s) &= \frac{\exp\left[-\frac{\rho s}{1-s}\right]}{1-s} \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \frac{L_q(\rho)}{q!} s^q \quad |s| < 1 \end{aligned} \quad (2.55)$$

En différenciant $U(\rho, s)$ par rapport à ρ et à s

$$L_{q+1}(\rho) + (\rho - 1 - 2q)L_q(\rho) + q^2 L_{q-1}(\rho) = 0 \quad (2.56)$$

$$\frac{d}{d\rho} L_q(\rho) - q \frac{d}{d\rho} L_{q-1}(\rho) + q L_{q-1}(\rho) = 0 \quad (2.57)$$

On montre que l'équation différentielle à plus petit ordre est :

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + q \right] L_q(\rho) \quad (2.58)$$

On utilise le polynôme de Laguerre généralisés

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho) \quad (2.59)$$

ce polynôme généralisé satisfait l'équation différentielle suivante

$$\left(\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (p + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + (q - p) \right) L_q^p(\rho) \quad (2.60)$$

On compare (2.48) et (2.60) et on pose que $\zeta = n$

Alors on obtient la solution $g(\rho)$ physiquement acceptable en fonction de polynôme

¹Pour calculer la fonction radiale on utilise le polynôme de Laguerre parce que la particule chargée est soumise dans un potentiel de coulomb qui a une symétrie sphérique.

de Lagurre generalisée dans la fonction generatrice $U(\rho, s)$

$$\begin{aligned} U_p(\rho, s) &= (-s)^p \frac{\exp\left(\frac{-\rho s}{(1-s)}\right)}{(1-s)^{p+1}} \\ &= \sum_{q=p}^{\infty} \frac{L_q^p(\rho)}{\Gamma(q+1)} s^q \end{aligned} \quad (2.61)$$

le polynome de Lagurre généralisés d'ordore $(q - p)$, en comparant (2.48) (2.60) en obtient

$$\left\{ \begin{array}{l} q = n + l \\ \text{et} \\ p = 2l + 1 \end{array} \right. \quad (2.62)$$

Avec $q - p = n_r$

alors

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-)^{k+1} \frac{(\Gamma(n+l+1))^2}{\Gamma(n-l-k)\Gamma(2l+k+2)\Gamma(k+1)} \frac{\rho^k}{\Gamma(k+1)} \quad (2.63)$$

On obtient finalement :

$$R_{n,l} = N_{n,l} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (2.64)$$

Avec $N_{n,l}$: constante de normalisation

voici quelque valeurs de polynome de Lagurre generalisées

$$\begin{aligned} L_1^1 &= -1 \} \text{ l'etats } 1S \\ L_2^1 &= -4 + 2\rho \} \text{ l'etats } 2S \\ L_3^3 &= -6 \} \text{ l'etats } 2P \end{aligned} \quad (2.65)$$

Pour déterminée la formule de la fonction radiale on doit calculer la constante de normalisation

2.3.4 Facteur de normalisation

La condition de normalisation exige que

$$\int |\Psi|^2 d\vec{r} = 1 \quad (2.66)$$

en tenant compte de la condition d'orthogonalité de la partie angulaire de la fonction d'onde

on a

$$\int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

En remplaçant $R_{n,l}(r)$ par son expression et en effectuons le changement de variable suivant :

$$r \longrightarrow \rho = \frac{2z}{na_\mu} r$$

Donc

$$|N_{n,l}|^2 \left(\frac{na_\mu}{2z}\right)^3 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} |L_{n+l}^{2l+1}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = 1 \quad (2.67)$$

En utilisant les propriétés du polynome de Laguerre

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} |L_{n+l}^{2l+1}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[\Gamma(n+l+1)]^3}{(n-l-1)!}$$

D'où la fonction radiale normalisée est

$$R(r) = - \left\{ \left(\frac{2z}{na_\mu}\right)^2 \frac{(n-l-1)!}{2n[\Gamma(n+l+1)]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\rho} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (2.68)$$

Rappelons que

$$\rho = \frac{2z}{na_\mu} r \quad \text{et} \quad a_\mu = \frac{m}{\mu} a_0$$

On peut calculer quelques fonctions radiales :

$$\text{Pour } \mathbf{n=1} \implies \begin{cases} n = 1 \\ l = 0 \end{cases} \implies R_{10}, L_1^1 = -1 \iff R_{1S}$$

$$\begin{aligned} R_{1S} &= - \left(\frac{2Z}{a_\mu} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{Z}{a_\mu} r} \\ &= 2 \left(\frac{Z}{a_\mu} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\left(\frac{z}{a_\mu}\right)r} \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\text{Pour } \mathbf{n=2} \implies \begin{cases} n = 2 \\ l = 0, 1 \end{cases} \implies R_{20}, L_2^1 = -4 + 2\rho \iff R_{2S}$$

$$R_{2S} = 2 \left(\frac{Z}{2a_\mu} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_\mu} \right) e^{-\frac{Z}{2a_\mu} r} \quad (2.70)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_\mu} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_\mu} \right) e^{-\frac{Z}{2a_\mu} r} \quad (2.71)$$

2.3.5 Fonction angulaire(partie angulaire) :

La partie angulaire de la fonction d'onde est donnée par les harmoniques sphériques², l'effet des opérateurs sur les fonctions propres L^2 et L_z donne les valeurs propres $\hbar^2 l(l+1)$ et $\hbar m$ respectivement

On pose que

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = F_{lm}(\theta) e^{im\varphi}$$

En injectant cette équation dans l'équation de Schrödinger (2.28)

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] F_{lm}(\theta) = 0 \quad (2.72)$$

²Comme pour n'importe quel potentiel central, les fonctions $\Psi(r)$ sont le résultat du produit d'une fonction radiale et un harmonique sphérique, pour visualiser leur dépendance angulaire on peut porter, sur l'axe caractérisé par les angles polaires θ et φ une longueur proportionnelle à $|\Psi|^2$ pour r fixé quelconque, c-à-d proportionnelle à Y_l^m

La solution de cette equation existe pour $-l \leq m \leq l$ et pour $0 \leq \theta \leq \pi$ elle est donnée par les polynomes de Legendre associés $P_l^m(\cos \theta)$ de degré l , soit en posant $\varpi = \cos \theta$

$$P_l(\varpi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\varpi^l} (\varpi^2 - 1)^l \quad (2.73)$$

$P_l(\varpi)$: peut être obtenu à partir de la fonction génératrice

$$P(\varpi, S) = (1 - 2S\varpi + S^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\varpi) S^l \quad |S| < 1 \quad (2.74)$$

$P_l(\varpi)$ vérifie l'équation différentielle suivante

$$\left[(1 - \varpi^2) \frac{d^2}{d\varpi^2} - 2\varpi \frac{d}{d\varpi} + l(l+1) \right] P_l(\varpi) = 0 \quad (2.75)$$

cette equation est équivalente à (2.72) pour $m = 0$

On obtient

$$\begin{cases} l = 0 \implies P_0(\varpi) = P_0(\cos \theta) = 1 \\ l = 1 \implies P_1(\varpi) = P_0(\cos \theta) = \cos \theta \\ l = 2 \implies P_2(\varpi) = P_0(\cos \theta) = \frac{1}{2} [3(\cos \theta)^2 - 1] \end{cases}$$

Les polynomes de Legendre associés, sont définis par

$$P_l^m(\varpi) = (1 - \varpi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\varpi^m} P_l(\varpi) \quad , m = 0, 1, 2, \dots$$

Satisfont les relation de recurrence :

$$(2l+1)\varpi P_l^m(\varpi) = (l+1-m)P_{l+1}^m(\varpi) + (l+m)P_{l-1}^m(\varpi)$$

$$(2l+1)(1-\varpi^2)^{\frac{1}{2}} P_l^{m-1}(\varpi) = P_{l+1}^m(\varpi) - P_{l-1}^m(\varpi)$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(\varpi) P_{l'}^{m'}(\varpi) d\varpi = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (2.76)$$

Quelque valeurs du polynome de legendre

$$P_1^1(\varpi) = p_1^1(\cos \theta) = (1 - \varpi^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$P_2^1(\varpi) = 3(1 - \varpi^2)^{\frac{1}{2}} - \varpi$$

$$P_2^2 = 3(1 - \varpi^2)$$

Alors les harmonique sphérique sont en général ,donnée par les expressions suivante :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{(\sin \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (2.77)$$

Quelques harmoniques sphériques :

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (2.78)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (2.79)$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (2.80)$$

Le tableau ci-dessous donne l'expression des fonctions d'onde des premiers niveaux d'energie :(pour l'atome d'hydrogène)[30]

Le niveau 1S	$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	(2.81)
Le niveau 2S	$\Psi_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	
Le niveau 2P	$\Psi_{2,1\pm} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	

Chapitre 3

Etude de l'effet du Moment

Electrique Dipolaire d'un électron

dans le cas non relativiste

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier l'effet du moment électrique dipolaire sur un atome d'hydrogène dans le cas non relativiste, pour cela nous allons résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule chargée de spin $\frac{1}{2}$ possédant un moment électrique dipolaire, nous allons calculer les niveaux des énergies et les fonctions d'onde en étudiant l'influence du moment électrique dipolaire, nous allons démontrer que ces derniers seront une généralisation des fonctions d'onde de Coulomb.

3.2 Le moment électrique dipolaire intrinsèque d'un électron dans un atome d'hydrogène :

L'existence possible du moment électrique dipolaire pour des particules élémentaires de spin $\frac{1}{2}$, a été sous la réserve de certaines théories récentes et recherches expérimentales. Théoriquement, il a été démontré que l'invariance des lois physiques sous la réflexion de l'espace ou le renversement du temps implique que tel moment n'existe pas, mais les mesures expérimentales ont prouvé la possibilité de mesurer le EDM

3.3 L'équation de Schrödinger pour un électron possédant un moment électrique dipolaire dans un atome d'hydrogène :

Considérons l'équation de Schrödinger pour une particule chargée non relativiste possédant un moment électrique dipolaire d_e dans un champ de Coulomb $\varepsilon = (-Ze/r^2)\hat{r}$, dans cette approximation on néglige le couplage spin-orbite produite par le moment ma-

gnétique de la particule. Par conséquent, si le moment électrique dipolaire est nul, les niveaux d'énergie sont entièrement déterminée par le nombre total quantique n où la dégénérescence d'un état n donné est $2n^2$. comme nous le verrons dans cette étude, cette dégénérescence sera élevée par l'interaction avec le moment dipolaire, de sorte que l'énergie ne dépend pas seulement du nombre quantique principale, mais aussi du moment cinétique total J , c'est un autre nombre quantique qui indique lequel des 2 états de parité opposée et prédominant.[31]

3.3.1 Equation de Schrodinger et séparation des états de parité différente

L'hamiltonien du système est ;

$$H = H_0 + H_{EDM} \quad (3.1)$$

où H_0 c'est l'hamiltonien d'une pour une particule chargée dans un champ de Coulomb

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r}$$

Alors l'hamiltonien lors de l'introduction du moment électrique dipolaire prend la forme suivante

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r} - \frac{Z\alpha d\sigma}{r^2} \quad (3.2)$$

avec ; ($\hbar = c = 1$)

Où

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} &= \text{cest l'énergie cinétique} \\ \frac{Z\alpha}{r} &= \text{potentiel coulombien} \\ \frac{Z\alpha d\sigma \cdot \hat{r}}{r^3} &= \text{l'interaction moment électrique dipolaire avec le champ de Coulomb} \end{aligned}$$

Le dernier terme représente l'interaction $d_e \cdot \varepsilon$ du moment dipolaire intrinsèque avec le champ de Coulomb.

L'équation de Schrodinger pour ce système est

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.3)$$

Le moment cinétique total $J = L + \frac{1}{2}\sigma$, commute avec l'hamiltonien H , de sorte que nous pouvons séparer l'équation de Schrodinger par la définition suivante de la fonction d'onde

$$\Psi_J(r) = f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \quad (3.4)$$

les fonctions f_J , g_J ne dépendent que de la distance $|r|$, et les états $|J, l\rangle$ sont des fonctions propres de J^2 , L^2 et J_z , effectuons maintenant notre études pour les deux états suivants :

l'état $|\frac{1}{2}, 0\rangle$ soit $S_{\frac{1}{2}}$

l'état $|\frac{3}{2}, 1\rangle$ soit $P_{\frac{3}{2}}$,

Ces états satisfont

$$\sigma \cdot \hat{r} | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle = | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \quad (3.5)$$

le ket $| J, l = J - \frac{1}{2} \rangle$ représente le Spin *down* \downarrow

le ket $| J, l = J + \frac{1}{2} \rangle$ représente le Spin *up* \uparrow

J : moment Cinétique total

l : moment Angulaire

En substituant (3.2) et (3.4) dans l'équation de Schrödinger on obtient :

$$\frac{P^2}{2m} \Psi \iff \frac{P^2}{2m} (f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle) \quad (3.6)$$

et

$$-\frac{Z\alpha}{r} \Psi \iff -\frac{Z\alpha}{r} (f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle) \quad (3.7)$$

et

$$-\frac{Z\alpha d\sigma \cdot \hat{r}}{r^3}\Psi \iff -\frac{Z\alpha d\sigma \cdot \hat{r}}{r^3}(f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2}\rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2}\rangle) \quad (3.8)$$

Pour simplifier on effectue le calcul de chaque terme à part :

On a ;

$$P = -i\hbar\vec{\nabla}$$

On pose $\hbar = c = 1$ et nous avons aussi $P^2 = -\vec{\nabla}^2 = -\Delta$

On a la formule de Laplacien dans les coordonnées sphériques est :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} (\frac{1}{\sin \theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + (\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2})$$

Nous utilisons les coordonnées sphériques puisque le potentiel ne depend que de la distance $|r|$. en mécanique quantique la relation du moment orbitale total définie par ;

$$L^2 = -[\frac{1}{r^2} (\frac{1}{\sin \theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + (\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2})]$$

On peut écrire

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{L^2}{r^2}$$

Alors

$$P^2 = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{L^2}{r^2}$$

On fait la substitution

$$\begin{aligned} \frac{P^2}{2m} (f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2}\rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2}\rangle) \\ = \frac{1}{2m} [-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{L^2}{r^2}] (f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2}\rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2}\rangle) \end{aligned} \quad (3.9)$$

comme nous l'avons expliqué dans la section précédente les valeurs propres de L^2 sont données par :

$$L^2\Psi = l(l+1)\Psi$$

Avec

$$l = J \pm \frac{1}{2}$$

On applique sur la fonction $f_J(r)$

$$\begin{aligned} \frac{P^2}{2m} \left(f_J(r) \mid J, l = J - \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{L^2}{r^2} \right] \left(f_J(r) \mid J, l = J - \frac{1}{2} \right\rangle & (3.10) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \left(f_J(r) \mid J, l = J - \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{J - \frac{1}{2} (J - \frac{1}{2} + 1)}{r^2} \right] \left(f_J(r) \mid J, l = J - \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{r^2} \right] \left(f_J(r) \mid J, l = J - \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

On applique sur la fonction $g_J(r)$

$$\begin{aligned} \frac{P^2}{2m} \left(g_J(r) \mid J, l = J + \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{L^2}{r^2} \right] \left(g_J(r) \mid J, l = J + \frac{1}{2} \right\rangle & (3.11) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{d}{dr}) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \left(g_J(r) \mid J, l = J + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{d}{dr}) + \frac{J + \frac{1}{2} (J + \frac{1}{2} + 1)}{r^2} \right] \left(g_J(r) \mid J, l = J + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dg_J}{dr}) + \frac{(J + \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}{r^2} g_J \right] \mid J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

Maintenant rassemblons tous les termes précédents(3.2) dans l'équation de Schrodinger en respectant l'orthonormalité des états $\mid J, l = J + \frac{1}{2} \rangle$ et $\mid J, l = J - \frac{1}{2} \rangle$, on obtient

finalement deux équations

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df_J}{dr} \right) + \frac{\alpha Z}{r} f_J - \frac{(J + \frac{1}{2})(J - \frac{1}{2})}{r^2} f_J + \frac{Z\alpha d}{r^2} g_J \right] = |E| f_J \quad (3.12)$$

et

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dg_J}{dr} \right) + \frac{\alpha Z}{r} g_J - \frac{(J + \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}{r^2} g_J + \frac{Z\alpha d}{r^2} f_J \right] = |E| g_J \quad (3.13)$$

Pour plus de simplification on fait un changement de variable, introduisant le variable sans dimension

$$\rho = (8m |E|)^{\frac{1}{2}} r \quad (3.14)$$

Alors

$$\begin{aligned} \rho &= (8m |E|)^{\frac{1}{2}} r \implies r = (8m |E|)^{-\frac{1}{2}} \rho \implies r^2 = (8m |E|)^{-1} \rho^2 \\ &\implies \frac{d}{dr} = (8m |E|)^{-\frac{1}{2}} \frac{d}{d\rho} \end{aligned} \quad (3.15)$$

On effectue le changement sur l'équation (3.12)

$$\frac{1}{2m} \frac{(8m |E|)}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z}{\rho} (8m |E|)^{\frac{1}{2}} f_J - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{\rho^2} (8m |E|) f_J + \frac{\alpha Z d}{\rho^2} (8m |E|) g_J = |E| f_J \quad (3.16)$$

Où

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2m} \frac{(8m |E|)}{\rho^2} \left(\frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z}{\rho} (8m |E|)^{\frac{1}{2}} f_J - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{2m\rho^2} 8m |E| f_J \right. \\ &\left. + \frac{\alpha Z d}{\rho^2} (8m |E|) g_J - |E| f_J = 0 \right) \times \frac{1}{8m |E|} \end{aligned}$$

Avec plus de simplifications

$$\left(\frac{1}{2m} \frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z (8m|E|)^{\frac{1}{2}}}{\rho \cdot 8m|E|} f_J - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2}) (8m|E|)}{2m\rho^2 \cdot 8m|E|} f_J \right. \\ \left. + \frac{\alpha Z d(8m|E|)}{\rho^2 \cdot 8m|E|} g_J - \frac{|E|}{8m|E|} f_J = 0 \right) \times 2m$$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z \cdot 2m (8m|E|)^{\frac{1}{2}} \times (8m|E|)^{\frac{1}{2}}}{\rho \cdot 8m|E| \times (8m|E|)^{\frac{1}{2}}} f_J - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{\rho^2} f_J + \frac{\alpha Z d \cdot 2m}{\rho^2} g_J - \frac{1}{4} f_J = 0$$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z \cdot 2m}{\rho (8m|E|)^{\frac{1}{2}}} f_J - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{\rho^2} f_J + \frac{\alpha Z d \cdot 2m}{\rho^2} g_J - \frac{1}{4} f_J = 0$$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \frac{\alpha Z \cdot 2m}{\rho (8m|E|)^{\frac{1}{2}}} - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{\rho^2} - \frac{1}{4} f_J + \frac{\alpha Z d \cdot 2m}{\rho^2} g_J = 0$$

Introduisons les quantités

$$\zeta = \frac{2m\alpha Z}{\sqrt{8m|E|}} \quad \text{et} \quad k = 2mZ\alpha d \quad (3.17)$$

L'équation (3.12) devient :

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df_J}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2})}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right) f_J + \frac{k}{\rho^2} g_J = 0 \quad (3.18)$$

On fait les même étapes de calcul pour l'équation (3.13) dépendant du terme g_J on trouve l'équation suivante :

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dg_J}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{(J + \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2})}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right) g_J + \frac{k}{\rho^2} f_J = 0 \quad (3.19)$$

La similitude des termes $\frac{k}{\rho^2} g_J$ et $\frac{k}{\rho^2} f_J$ sont à l'origine de l'effet du moment dipolaire

Les termes $(J - \frac{1}{2})(J + \frac{1}{2}) f / \rho^2$ et $(J + \frac{1}{2})(J + \frac{3}{2}) g / \rho^2$ leurs origine est le potentiel central

Nou sommes dans la recherche d'une solution de la forme

$$g(r) = cf(r) \quad (3.20)$$

On remplace dans (3.12) (3.13) et on fait l'équivalence entre les deux équations

Donc

$$-\left(J + \frac{1}{2}\right) \left(J - \frac{1}{2}\right) + kc = -\left(J + \frac{1}{2}\right) \left(J + \frac{3}{2}\right) + \frac{k}{c} \quad (3.21)$$

$$\left(J + \frac{1}{2}\right) \left[\left(J + \frac{3}{2}\right) - \left(J - \frac{1}{2}\right)\right] = \frac{k}{c} - kc$$

$$\left(J + \frac{1}{2}\right) \left[J + \frac{3}{2} - J + \frac{1}{2}\right] = \frac{k}{c} - kc$$

$$kc^2 + (2J + 1)c - k = 0 \quad (3.22)$$

C'est une équation différentielle 2^{ième} ordre dont on peut calculer ses racines c_+ et c_-

$$\Delta = (2J + 1)^2 + 4k^2$$

$$\sqrt{\Delta} = ((2J + 1)^2 + 4k^2)^{\frac{1}{2}}$$

Donc

$$c_+ = \frac{\left(\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 + k^2\right)^{\frac{1}{2}} - \left(J + \frac{1}{2}\right)}{k} \quad (3.23)$$

Et

$$c_- = \frac{-\left(\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 + k^2\right)^{\frac{1}{2}} - \left(J + \frac{1}{2}\right)}{k} \quad (3.24)$$

On employe la relation entre les deux racines c_+ et c_-

$$c_+ \times c_- = -1$$

On écrit

$$c_{\pm} = \frac{k}{\left((J + \frac{1}{2})^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \pm (J + \frac{1}{2})} \quad (3.25)$$

ou encore

$$c_{\pm} = \frac{-(J + \frac{1}{2}) \pm \left((J + \frac{1}{2})^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{k} \quad (3.26)$$

On applique la condition $g(r) = cf(r)$ pour les deux valeurs de c_{\pm} dans l'équation(3.12) ou dans (3.13) on aura le même résultat car les deux équations sont équivalentes, prenons alors l'équation (3.12)

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{1}{4} \right) f - \frac{(J + \frac{1}{2})(J - \frac{1}{2})}{\rho^2} f + \frac{k(J + \frac{1}{2}) \pm \left((J + \frac{1}{2})^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{k\rho^2} f = 0$$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{1}{4} \right) f - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) \left(J - \frac{1}{2} + 1 \right) \pm \left(\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] f = 0$$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{1}{4} \right) f - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 \pm \left(\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] f = 0$$

Donc

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{df}{d\rho} \right) + \left(\frac{\zeta}{\rho} - \frac{1}{4} \right) f - \frac{S_{\pm}(S_{\pm} + 1)}{\rho^2} f = 0 \quad (3.27)$$

Où

$$S_{\pm}(S_{\pm} + 1) = \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 \mp \left(\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 + k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.28)$$

Si cette condition est satisfaite les deux équations (3.12) et (3.13) sont équivalentes.

L'équation (3.27) est a la forme de l'équation d'onde radial ordinaire pour une particule chargée dans un champ de Coulomb, où S_{\pm} remplace le moment angulaire ici on prend le moment cinétique à cause du spin. $J = L + \frac{1}{2}\sigma$

les petits k c'est-à-petit moment dipolaire. ($k = 2mZ\alpha d$)

il peut être vu en élargissant l'équation (3.27) alors

$$\begin{aligned}
S_+(S_+ + 1) &= \left(J + \frac{1}{2}\right) \left(J - \frac{1}{2}\right) - \frac{k^2}{\left(J + \frac{1}{2}\right) + \left[\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 + k^2\right]^{\frac{1}{2}}} \\
&= \left(J + \frac{1}{2}\right) \left(J - \frac{1}{2}\right) - \frac{k^2}{2\left(J + \frac{1}{2}\right) \left[1 + \frac{k^2}{\left(J + \frac{1}{2}\right)}\right]^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned}$$

à cause de $k \ll 0$ donc

$$S_+(S_+ + 1) \simeq \left(J - \frac{1}{2}\right) \left(J + \frac{1}{2}\right) - \frac{k^2}{2\left(J + \frac{1}{2}\right)} \quad (3.29)$$

en fait le même calcul pour trouver la forme de $S_-(S_- + 1)$

$$\begin{aligned}
S_-(S_- + 1) &= \left(J - \frac{1}{2}\right) \left(J + \frac{3}{2}\right) + \frac{k^2}{\left(J + \frac{1}{2}\right) + \left[\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 + k^2\right]^{\frac{1}{2}}} \\
&= \left(J - \frac{1}{2}\right) \left(J + \frac{3}{2}\right) - \frac{k^2}{2\left(J + \frac{1}{2}\right) \left[1 + \frac{k^2}{\left(J + \frac{1}{2}\right)}\right]^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned}$$

Alors

$$S_-(S_- + 1) \simeq \left(J - \frac{1}{2}\right) \left(J + \frac{3}{2}\right) + \frac{k^2}{2\left(J + \frac{1}{2}\right)} \quad (3.30)$$

en suite selon $(g_J(r) = cf_J(r))$, (3.26), (3.27) et (3.28), si le dipôle moment est petite des deux solutions de (3.26) représentent Etats qui contiennent surtout un ou l'autre principalement de les deux états de l'atome d'hydrogène avec une égale J et différente.

à partir de l'équation (3.27) et à cause de la valeur inférieur de d_e , nous allons impliquer la solution exacte de l'équation de Schrodinger pour les états purs de Coulomb déjà traités dans la section précédente.

Les solutions normalisables (3.27) sont «généralisée» en fonctions d'onde de Coulomb

de la forme ;

$$f_{n,J,S_{\pm}} = N_{n,J,S_{\pm}} e^{\frac{-1}{2}\rho} \rho^{S_{\pm}} L_n^{2S_{\pm}+1}(\rho) \quad (3.31)$$

tel que : $N_{n,J,S_{\pm}}$:est une constante de normalisation, n est un nombre positive entier lié à la valeur propre ζ par

$$n = \zeta - S_{\pm} - 1 \quad (3.32)$$

$L_n^{2S_{\pm}+1}(\rho)$:sont les polynômes de Laguerre associés

$$L_n^{2S_{\pm}+1}(\rho) = \frac{\Gamma(n + 2S_{\pm} + 2)}{\Gamma(n + 1)} \frac{e^{\rho}}{\rho^{2S_{\pm}+1}} \frac{d}{d\rho^n} (e^{-\rho} \rho^{n+2S_{\pm}+1}) \quad (3.33)$$

3.3.2 Les valeurs propres (niveaux d'énergie) :

On utilise les expressions (3.17) et (3.32) et le fait que $n = \zeta - S_{\pm} - 1$

$$\zeta = \frac{2m\alpha Z}{\sqrt{-8m|E|}} \quad \text{avec} \quad E \rightarrow E_{n,J,s_{\pm}}$$

$$\zeta = \frac{2m\alpha Z}{\sqrt{-8m|E|}} = (n + s_{\pm} + 1)$$

$$\zeta^2 = \left(\frac{2m\alpha Z}{\sqrt{-8m|E|}} \right)^2 = (n + s_{\pm} + 1)^2$$

$$-\frac{m\alpha^2 Z^2}{2|E|} = (n + s_{\pm} + 1)^2$$

Donc les valeurs de l'énergie sont données par

$$|E_{n,J,s_{\pm}}| = -\frac{m\alpha^2 Z^2}{2(n + s_{\pm} + 1)^2} \quad (3.34)$$

Alors les niveaux des énergies donnés par cette expression sont semblable à celle de la formule de Bohr, cependant, $(n + s + 1)$ n'est pas un nombre entier en général. pour une valeur de n et J donné et pour chaque S_+ ou S_- choisit implique une valeur différente de l'énergie[32]

3.3.3 les vecteurs propres :

On a,

$$\Psi_J(r) = f_J(r) | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + g_J(r) | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle$$

et

$$g(r) = Cf(r)$$

donc

$$\begin{aligned} \Psi_J(r) &= f(r) | J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + Cf(r) | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \\ \Psi_J(r) &= f(r) \left(| J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + C | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \right) \end{aligned}$$

$f(r) \Rightarrow f(r)_{n,J,S_{\pm}}$ et $\Psi \longrightarrow \Psi_{n,J,S_{\pm}}$

et

$$f_{n,J,S_{\pm}} = N_{n,J,S} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{S_{\pm}} L_n^{2S_{\pm}+1}(\rho)$$

Alors

$$\Psi_{\pm} = N_{n,J,S} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{S_{\pm}} L_n^{2S_{\pm}+1}(\rho) \left(| J, l = J - \frac{1}{2} \rangle + C_{\pm} | J, l = J + \frac{1}{2} \rangle \right)$$

3.3.4 Facteur de normalisation $N_{n,J,S_{\pm}}$

pour trouver $N_{n,J,S}$ on doit calculer

premierement en calcule Ψ_+ pour S_+ et on fait le même calcule pour le 2^{ème} vecteur Ψ_- pour S_-

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n,J,S_{\pm}} | \Psi_{n,J,S_{\pm}} \rangle &= 1 \quad \text{ou} \quad \int |\Psi_{n,J,S_{\pm}}|^2 dr = 1 \\ \int_0^{\infty} |f_{n,J,S_+}(r)|^2 r^2 dr &\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2}_{=1} = 1 \end{aligned} \quad (3.35)$$

Parceque $Y_l^m(\theta, \varphi)$ est orthogonale

Donc on calcule

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 r^2 dr = 1$$

Et effectuont le changement de variable suivant :

$$\rho = \frac{2Z}{ka_0} r$$

Tel que $k = (n + S_+ + 1)$

$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$: rayon de Bohr

$$\Psi_{n,J,S_+} = |N_{n,J,S_+}|^2 e^{-\rho} \rho^{2S_+} |L_n^{2S_++1}(\rho)|^2 \left[|J, l = J - \frac{1}{2}\rangle + \frac{k}{(J+\frac{1}{2}) + [(J+\frac{1}{2})^2 + k^2]^{\frac{1}{2}}} |J, l = J + \frac{1}{2}\rangle \right] \quad (3.36)$$

Alors

$$\int_0^\infty |N_{n,J,S_+}|^2 e^{-\rho} \rho^{2S_+} |L_n^{2S_++1}(\rho)|^2 \left(\frac{(n + S_+ + 1) a_0}{2Z} \right)^3 (1 + c_+^2) \rho^2 d\rho = 1$$

Utilison les propréties du polynom de Lagurre

$$\int_0^\infty x^m e^{-x} |L_n^m(x)|^2 x^2 dx = \frac{[\Gamma(n + m + 1)]^3 (2n - m + 1)}{n!} \quad (3.37)$$

Alors ;

$$\int_0^\infty \rho^{2S_+} e^{-\rho} |L_n^{2S_++1}(\rho)|^2 \rho^2 d\rho = \frac{[\Gamma(2S_+ + n + 2)]^3 (2n - 2S_+ + 2)}{n!}$$

Donc

$$|N_{n,J,S_+}|^2 \frac{[\Gamma(2S_+ + n + 2)]^3 (2n - 2S_+ + 2)}{n!} \left(\frac{(n + S_+ + 1) a_0}{2Z} \right)^3 (1 + c_+^2) = 1$$

$$|N_{n,J,S_+}|^2 \frac{[\Gamma(2S_+ + n + 2)]^3 (2n - 2S_+ + 2)}{n!} \left(\frac{(n + S_+ + 1) a_0}{2Z} \right)^3 \left(1 + \frac{k^2}{\left((J+\frac{1}{2}) + ((J+\frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2} \right) = 1$$

$$|N_{n,J,S_+}|^2 = \left[\frac{[\Gamma(2S_+ + n + 2)]^3 (2n - 2S_+ + 2) \left(\frac{(n + S_+ + 1) a_0}{2Z} \right)^3 \left(1 + \frac{k^2}{\left((J + \frac{1}{2}) + ((J + \frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2} \right)}{n!} \right]^{-1}$$

Donc

$$|N_{n,J,S_+}|^2 = \left[\left(\frac{2Z}{(n + S_+ + 1) a_0} \right)^3 \frac{n!}{2(n + S_+ + 1) [\Gamma(n + 2S_+ + 2)]^3} \left(\frac{\left((J + \frac{1}{2}) + ((J + \frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2}{\left((J + \frac{1}{2}) + ((J + \frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2 + k^2} \right) \right] \quad (3.38)$$

Est la formule de la constante de normalisation pour le spin S_+

$$\Psi_{n,J,s_-} = |N_{n,J,S_-}|^2 e^{-\rho} \rho^{2S_-} |L_n^{2S_-+1}(\rho)|^2 \left[\frac{-k}{(J + \frac{1}{2}) + [(J + \frac{1}{2})^2 + k^2]^{\frac{1}{2}}} |J, l = J - \frac{1}{2}\rangle + |J, l = J + \frac{1}{2}\rangle \right] \quad (3.39)$$

Et

$$|N_{n,J,S_-}|^2 = \left[\left(\frac{2Z}{(n + S_- + 1) a_0} \right)^3 \frac{n!}{2(n + S_- + 1) [\Gamma(n + 2S_- + 2)]^3} \left(\frac{\left((J + \frac{1}{2}) + ((J + \frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2}{\left((J + \frac{1}{2}) + ((J + \frac{1}{2})^2 + k^2)^{\frac{1}{2}} \right)^2 + k^2} \right) \right] \quad (3.40)$$

Les valeurs de l'énergie :

$$\text{pour } \begin{cases} n = 1, & J = \frac{1}{2}, & S = S_+ & \implies E \left(2S_{\frac{1}{2}} \right) \\ n = 0, & J = \frac{1}{2}, & S = S_- & \implies E \left(2P_{\frac{1}{2}} \right) \\ n = 0, & J = \frac{3}{2}, & S = S_+ & \implies E \left(2P_{\frac{3}{2}} \right) \end{cases}$$

Alors,

$$|E_{n,J,s_{\pm}}| = -\frac{Z^2 m \alpha^2}{2(n + s_{\pm} + 1)^2}$$

$$E_{1, \frac{1}{2}, S_+} = -\frac{Z^2 m \alpha^2}{2} \frac{1}{(2 + s_+)^2} \quad (3.41)$$

$$E_{0, \frac{1}{2}, S_-} = -\frac{Z^2 m \alpha^2}{2} \frac{1}{(1 + s_-)^2} \quad (3.42)$$

$$E_{0, \frac{3}{2}, S_-} = -\frac{Z^2 m \alpha^2}{2} \frac{1}{(1 + s_+)^2} \quad (3.43)$$

Le moment électrique dipolaire affecte les niveaux d'énergie de l'atome de l'hydrogène, en particulier sur les états $2S_{\frac{1}{2}}$ et $2P_{\frac{3}{2}}$, son effet est similaire au Lamb shift dans le cas relativiste, mais les corrections radiatives comme le Lamb shift sont apportées par l'équation de Dirac, dans le cas non relativiste ces deux états peuvent en outre être divisés par l'interaction d'un moment électrique dipolaire de l'électron avec le champ Coulombien, donc le moment électrique dipolaire doit être très petit pour respecter l'accord entre la valeur expérimentale de cette division et la valeur prédite par l'électrodynamique quantique.

Chapitre 4

*Le moment électrique dipolaire d'un
électron dans le cas relativiste*

4.1 Introduction :

Pour mesurer l'EDM de l'électron on doit appliquer un champ électrique extérieur or les électrons ne sont pas libres, ils sont liés dans un atome ou ion. donc on confronte un problème qui a été signalé en premier temps par Schiff expliqué par le théorème de Schiff.

4.2 Théorème de Schiff :

Le théorème de Schiff [33] annonce qu'on ne peut pas mesurer le moment électrique dipolaire de l'électron dans l'atome, à cause de l'interaction de la valence électronique avec le champ extérieur ce qui crée un effet d'écran qui empêche la détection du moment électrique dipolaire, dans ce qui suit on examine le mécanisme de Schiff [32] [34] [35]

Schiff considère que l'hamiltonien d'un système en interaction coulombienne soumis dans un champ électrique extérieur E_{ext}

$$H_0^{NR} = \sum_i \left(\frac{P_i^2}{2m} - eV_0(r_i) + er_i E_{ext} \right) \quad (4.1)$$

avec ;

$$V_0(r_i) = \frac{Ze}{r_i} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e}{|r_i - r_j|}$$

P et T violée \Rightarrow l'hamiltonien de l'EDM ; d_e non nul

$$H_{EDM}^{NR} = - \sum_i d_i \cdot E_i$$

Tel que ;

$$E_i = -\nabla_i V(r_i) + E_{ext}$$

d_i : représente le moment électrique dipolaire pour i particules

le théorème de Schiff permet d'écrire l'hamiltonien totale du systeme ;

$$H^{NR} = H_0^{NR} + H_{EDM}^{NR} \quad (4.2)$$

$H^{NR} \rightarrow$ depend de H_0^{NR}

$$\begin{aligned} H^{NR} &= H_0^{NR} + H_{EDM}^{NR} \\ &= \exp\left(-i \sum_i \frac{1}{e} P_i \cdot d_i\right) H_0^{NR} \exp\left(i \sum_i \frac{1}{e} P_i \cdot d_i\right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

On remplace la relation de H^{NR} dans l'equation (4.2)

$$\exp\left(-i \sum_i \frac{1}{e} P_i \cdot d_i\right) H_0^{NR} \exp\left(i \sum_i \frac{1}{e} P_i \cdot d_i\right) = H_0^{NR} - \sum_i d_i \cdot E_i + O(g^2)$$

$O(g^2)$ (ampliatif dans le [37] page1225)

En utilisant les transformations unitaires on obtient le même spectre d'énergie pour H^{NR} et H_0^{NR}

donc, on dit que l'effet de H_{EDM}^{NR} est absorbée dans l'hamiltonien originale alors l'effet du moment électrique dipolaire ne peut pas être observé

“Schiff dit que l'invariance du moment électrique dipolaire peut être masqué par les effets relativistes ou une autre interaction forte”

Remarque :

Ce théorème est vrai seulement dans la limite non-relativiste. on ne peut surmonter ce problème que par l'introduction de la relativité restreinte il faut alors utiliser une équation relativiste tel que l'équation de Dirac qui prend en considération les effets relativistes comme la structure fine et le Lamb Shift.

4.3 Le lagrangien de l'interaction d'un moment électrique dipolaire avec un champ électromagnétique :

Pour construire la densité lagrangienne invariante par les transformations de Lorentz pour l'interaction du moment électrique dipolaire d'un fermion de spin $\frac{1}{2}$ avec un champ électromagnétique, nous allons d'abord rappeler une expression analogue c'est la densité lagrangienne pour un moment magnétique[35] (moment Pauli) :

$$\mathcal{L}_{Pauli} = -\kappa \frac{\mu_B}{2} \bar{\Psi} \sigma^{\mu\nu} \Psi F_{\mu\nu} \quad (4.4)$$

Ψ : le champ de Dirac pour le fermion

$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$: le champ conjugué de Dirac pour le fermion

Avec

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu)$$

$\gamma^{\mu,\nu}$: (matrice de Dirac 4×4) .[36]

$F_{\mu\nu}$: tenseur du champ électromagnétique

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_x & \varepsilon_y & \varepsilon_z \\ -\varepsilon_x & 0 & B_z & B_y \\ -\varepsilon_y & B_z & 0 & -B_x \\ -\varepsilon_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

μ_B : est le moment magneton de Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27401 \times 10^{-24} J/T$$

κ : constante

On récrit la densité lagrangienne \mathcal{L}_{Palui} en fonction des champ ε et B

$$\mathcal{L}_{Palui} = \kappa\mu_B \bar{\Psi}(\Sigma \cdot B - i\alpha \cdot \varepsilon)\Psi \quad (4.5)$$

Sachant que

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}$$

σ :matrice de Pauli

La densité lagrangienne du moment magnétique \mathcal{L}_{Palui} est invariante par les transformations de la parité P et le renversement de temps T , l'introduction de quelques transformation sur la densité lagrangienne \mathcal{L}_{Palui} implique la violation PT il résulte alors une densité lagrangienne approprié au moment électrique dipolaire ;

Pour construire la densité lagrangienne du moment électrique dipolaire en remplace B par ε et ε par $-B$ et puis on introduit les transformations suivante

On remplace $\sigma^{\mu\nu}$ par :

$$\sigma^{\mu\nu} = i\sigma^{\mu\nu}\gamma^5 \quad (4.6)$$

avec

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (4.7)$$

et

$$\kappa\mu_B = d_e$$

On obtient alors la densité lagrangienne du moment électrique dipolaire ;

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{EDM} &= -i\frac{d_e}{2}\bar{\Psi}\sigma^{\mu\nu}\gamma^5\Psi F_{\mu\nu} \\ &= d_e\bar{\Psi}(\Sigma \cdot \varepsilon + i\alpha \cdot B)\Psi \end{aligned} \quad (4.8)$$

La densité Hamiltonienne

$$\overline{\mathcal{H}} = -d_e \overline{\Psi} (\Sigma \cdot \varepsilon + i\alpha \cdot B) \Psi$$

Pour calculer le hamiltonien on introduit la transformation

$$\mathcal{H} = \Psi^\dagger H \Psi = \overline{\Psi} \gamma^0 H \Psi \quad (4.9)$$

L'Hamiltonien de moment électrique dipolaire

$$H_{EDM} = -d_e (\gamma^0 \Sigma \cdot \varepsilon + i\gamma \cdot B) \quad (4.10)$$

4.4 Les effets relativistes :

Comme nous avons vu dans le théorème de Schiff la mesure du moment électrique dipolaire est impossible à cause de l'effet écran produit par la valence électronique dans l'atome lors de l'application d'un champs éterieur dans le but de mesurer le EDM, pour cela on a utilisé l'équation de Dirac pour pouvoir calculer les effet relativistes et alors pour mesurer le EDM

L'équation de Schrödinger n'est pas covariante avec dans la relativité réstimate elle decrit des particules dont l'énergie et la quantité de mouvement, sont liée par $E = \frac{P^2}{2m} + V$

En 1928 Dirac proposa sont équation relativiste

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_D \Psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-i\hbar C \vec{\alpha}_i \vec{\nabla}_i + m\beta C^2 \right) \Psi$$

4.4.1 L'équation de Dirac pour un atome dans un champ électrique extérieur :

et l'hamiltonien de Dirac pour un champs extérieur est ;[37]

$$H = \alpha \cdot P + m\gamma^0 - e(\phi_i + \phi_l) \quad (4.11)$$

avec ;

ϕ_i : le potentiel électrostatique intérieur

ϕ_l : le potentiel électrostatique extérieur

Les états propres de H sont dénotés par $|\Psi\rangle$, ici on introduit l'hamiltonien du moment électrique dipolaire comme une perturbation, on considère que $B = 0$, alors

$$H = H_{EDM} = -d_e\gamma^0\Sigma \cdot \varepsilon \quad (4.12)$$

Avec

$$\varepsilon = -\nabla\phi = -\nabla(\phi_i + \phi_l) \quad (4.13)$$

ε : est le champs électrique totale, on peut écrire alors

$$H_{EDM} = -d_e\Sigma \cdot \varepsilon - d_e(\gamma^0 - 1)\Sigma \cdot \varepsilon \quad (4.14)$$

le premier terme ($-d_e\Sigma \cdot \varepsilon$) dans cette équation représente la valeur de l'hamiltonien du EDM dans le cas non relativiste, il ne contribue pas dans les corrections des énergies au premier ordre due au présence de EDM , on applique le théorème des perturbations, on peut écrire[36]

$$-d_e\Sigma \cdot \varepsilon = \frac{d_e}{e}\Sigma \cdot \nabla e\phi = \frac{id_e}{e} [\Sigma \cdot p, e\phi] \quad (4.15)$$

On introduit l'hamiltonien de Dirac (4.11)

$$-d_e \Sigma \cdot \varepsilon = -\frac{id_e}{e} [\Sigma \cdot P, (H - c\alpha \cdot p - mc^2)] \quad (4.16)$$

Avec

$$[\Sigma \cdot p, \alpha \cdot p] = 0 \quad \text{et} \quad [\Sigma \cdot p, \gamma^0] = 0$$

Alors

$$\langle \Psi | -d_e \Sigma \cdot \varepsilon | \Psi \rangle = -\frac{id_e}{e} \langle \Psi | [\Sigma \cdot P, H] | \Psi \rangle = 0 \quad (4.17)$$

qui est nulle parce que $|\Psi\rangle$ c'est une valeur propre de H , mais il faut noter ici que le deuxième terme dans l'équation de l'hamiltonien du EDM (4.13) existe encore ce qui contribue au premier ordre de correction radiative de l'énergie le Lamb shift (voir annex), alors on peut écrire

$$\Delta E = \langle \Psi | -d_e (\gamma^0 - 1) \Sigma \cdot \varepsilon | \Psi \rangle \neq 0 \quad (4.18)$$

Ce qui prouve que le théorème de Schiff n'est pas applicable dans le cas relativiste.

Conclusion :

Nous avons démontré dans le premier chapitre de ce travail que le moment électrique dipolaire dépend de la deuxième classe de la symétrie ; les symétries discrètes P , T et C plus précisément l'existence du moment électrique dipolaire pour une particule élémentaire implique la violation des symétries P et T , bien que le moment électrique dipolaire est une source de violation de la symétrie CP dans le modèle Standard, les expériences qui ont mesuré le moment électrique dipolaire ont été établies selon des modèles au-delà du modèle standard SM , la valeur expérimentale et l'ordre de grandeur du moment électrique dipolaire ne sont pas compatibles avec sa valeur démontrée théoriquement, alors jusqu'à maintenant cette quantité physique n'est pas encore confirmée.

Dans ce travail nous avons étudié l'influence du moment électrique dipolaire sur les niveaux des énergies de l'atome de l'hydrogène, nous avons résolu l'équation de Schrodinger pour un électron non relativiste possédant un moment électrique dipolaire EDM , soumis à un potentiel coulombien d'un atome d'hydrogène, nous avons calculé les états propres et leurs vecteurs propres, nous avons démontré que pour pouvoir résoudre l'équation de Schrodinger le EDM doit avoir une valeur très petite, nous avons démontré que μEDM affecte les états des énergies et leurs fonctions d'onde notamment les niveaux $2S_{\frac{1}{2}}$ et $2P_{\frac{3}{2}}$, l'effet du EDM manifeste comme une correction sur l'énergie, cette correction est l'équivalent du Lamb shift dans le cas relativiste qui enlève la dégénérescence particulièrement sur les états $2S_{\frac{1}{2}}$ et $2P_{\frac{1}{2}}$.

Nous avons aussi discuté le théorème de Schiff qui prédit la difficulté de mesurer le EDM de l'électron dans un atome à cause de l'interaction de la valence électronique avec le champ extérieur ce qui applique un effet d'écran sur le EDM , nous avons démontré la non validité de ce théorème dans le cas non-relativiste, où il est nécessaire d'utiliser l'équation de Dirac, ce qui entraîne l'apparition des effets relativistes des corrections d'ordre supérieur sur l'énergie, comme le Lamb shift et la structure fine, ces effets peuvent en outre interagir avec le EDM et jouent le rôle d'amplification pour ce dernier.

Annexe A

4.5 Fonction de Legendre :

Les Equation differentielle de Legendre :

Les fonctions de Legendre apparaissent comme solutions de l'équation différentielle

$$(1 - x^2) y'' - 2xy' + n(n + 1)y = 0 \quad ((A.1))$$

dite équation différentielle de Legendre. La solution générale de l'équation différentielle, dans le cas où $n = 0, 1, 2, \dots$ est donnée par

$$y = c_1 p_n(x) + c_2 q_n(x) \quad ((A.2))$$

où les $p_n(x)$ sont des polynômes appelés polynômes de Legendre, et $q_n(x)$ sont appelés fonctions de Legendre de seconde espèce. Les $q_n(x)$ ne sont pas bornés en $x = \pm 1$.

L'équation différentielle (A.1) est obtenue, à partir de l'équation de Laplace $\nabla^2 u = 0$, exprimée en coordonnées sphériques (r, θ, φ) quand on suppose que u est indépendant de φ .

Annexe B

4.6 L'effet de Lamb shift :

D'après la théorie de Dirac et de Schrödinger les niveaux des énergies avec les même nombres quantiques n et j mais l différents devraient être dégénérés .par exemple $2S_{\frac{1}{2}}(n = 2, l = 0, J = \frac{1}{2})$ et $2P_{\frac{1}{2}}(n = 2, l = 1, J = \frac{1}{2})$ états d'atome de l'hydrogène sont dégénéré mais l'état S avait légèrement plus haut énergie connu par une quantité $\Delta E = 4,372 \times 10^{-6} eV$

En 1951 Willis Lamb a expliqué ce effet dans le cadre du theorie de l'electrodynamique quantique

Pour $l = 0$

$$\Delta E_{Lamb} = \alpha^5 m C^2 \frac{1}{4n^3} \{k(n, 0)\} \quad (4.19)$$

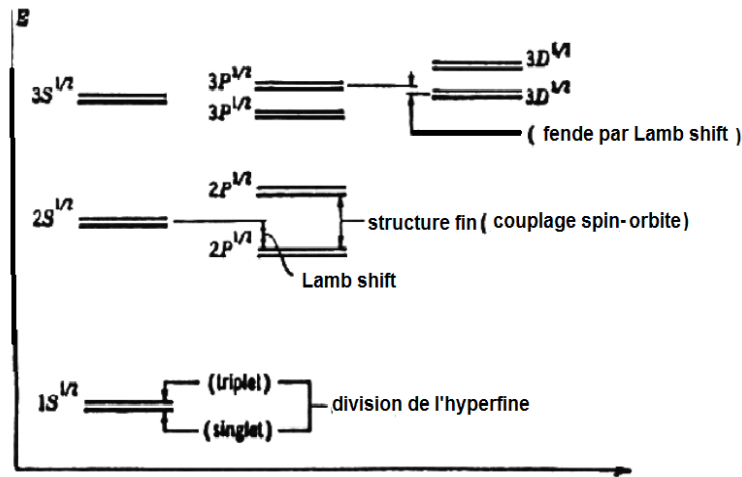
avec $\{k(n, 0)\}$:est un facteur numérique de lequel varie légèrement avec n de 12,7 a 13,2

pour $l \neq 0$

$$\Delta E_{Lamb} = \alpha^5 m C^2 \frac{1}{4n^3} \left\{ k(n, l) \pm \frac{1}{\pi(J + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2})} \right\} \quad (4.20)$$

pour $j = l \pm \frac{1}{2} \Rightarrow k(n, l)$:est un petit facteur numérique $< 0,05$ lequel varie légèrement

avec n et l , remarquée que le lamb shift est très petit pour l'exception $l = 0$



Quelques tats d'nergie bas de l'atome de l'hydrogene y compris structure fine, hyperfine et Lamb shift.

4.7 La structure fine :

En 1916 Wilson et Sommerfeld supposent que les électrons ont des trajectoires elliptique et non circulaires l'un des foyers de l'ellipse étant confondu avec le noyau. Ils séparent alors la quantification de l'action en deux parties :

- la quantification de l'action suivant le rayon r :

$$\int P_k dr = k\hbar$$

ou k appelé nombre quantique radiale.

- la quantification de l'action suivant l'azimut φ :

$$\int P_l d\varphi = l\hbar$$

où l appelé nombre quantique azimutal.

ils obtiennent alors les etats d'nergie de l'atome d'hydrogene sous la forme :

$$E_{k,l} = \frac{E_1}{(k+l)^2}$$

et en posant :

$n = (k+l)$ appelé nombre quantique principale donc $E_n = \frac{E_1}{n^2}$

Semmerfeld reprend alors le calcul en dynamique relativiste et trouve que l'énergie s'écrit :

$$E_{k,l} = \frac{E_1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

α : est la constante de structure fine.

avec

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{q^2}{\hbar c} \\ &= \frac{1}{137} \end{aligned}$$

L'examen des spectres atomiques avec le spectrometre de haute résolution montre que les différents raies présentent une structure fine (un raie est composée en réalité de plus d'un raies : 2 plus) due à une séparation des niveaux d'énergie à cause des effets relativistes ces effets de niveaux d'énergie sont obtenus en résolvant l'équation de Dirac.

Les niveaux d'énergie sont dégénérée et le degré de dégénérescence est $2n^2$

en tenant compte les effets relativistes cette dégénérescence est partiellement levée en ce sens que le niveau d'énergie dépend de n et de J chaque niveau se divise en n sous-niveaux correspondant à $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$ cette séparation est appelée *structure fine* la constante α qui contrôle la séparation des niveaux d'énergie

► Correction relativiste :

On considère les effets relativistes comme une perturbation du 1^{ère} ordre d'hamiltonien non relativiste,

tel que et

$$H_1 = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Pour calculer la correction on doit calculer ΔE_1

$$\Delta E_1 = \langle H \rangle = \int \Psi^* H \Psi d^3r$$

$$\Delta E_1 = -\alpha^4 m c^2 \frac{1}{4n^2} \left[\frac{2n}{(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{2} \right]$$

► Correction de l'interaction spin-orbite :

On considère les effets relativiste comme une perturbation du 2^{ème} ordre d'hamiltonien non relativiste

$$\begin{aligned} H'_2 &= \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} (L \cdot S) \\ &= \frac{1}{2m^2c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} \end{aligned}$$

Avec

$$L \cdot S = \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

$$\Delta E_2 = \left\langle \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} (L \cdot S) \right\rangle$$

On obtient

$$\Delta E_2 = -E_n \frac{(E\alpha)^2}{2nl(l + \frac{1}{2})(l+1)} \begin{cases} l & \text{pour } J = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1 & \text{pour } J = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Bibliographie

- [1] M. S. Sozzi, Discrete Symmetries and CP Violation, From Experiment to Theory, Oxford University Press, 2008.
- [2] L. Marleau, Introduction à la physique des particules, Université Laval, Québec, Canada, 1998.
- [3] B. R. Martin, Nuclear and Particle Physics, University College London, 2006.
- [4] E. Noether, N.d.Konig, G.d.Wiss, Math-phys. Klasse 235-257(1918)
- [5] R.G. Sachs, The Physics of Time Reversal, University Of Chicago Press, 1987.
- [6] I.I. Bigi, A.I. Sanda, CP violation, Cambridge university press, 2000.
- [7] J.P. Derendinger, Théorie quantique des champs, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 2001.
- [8] R. Aleksan, La violation de CP, Proceedings de l'école de GIF, Palaiseau, 1991.
- [9] E.P. Wigner, Violations of symmetry in Physics, Scientific American 213 (1965).
- [10] A. Messiah, Mécanique quantique, Dunod, 1959.
- [11] M. Shaposhnikov, Champs Quantiques Relativistes, Sven Bachmann, 2005.
- [12] R.P. Stutz, Towards Measuring the Electron Electric Dipole Moment Using Trapped Molecular Ions, B.S, PhD thesis, University of Kansas, 1998.
- [13] W. Greiner, B. Muller, Mécanique quantique - symétries, Springer, 1999.
- [14] J. Schwinger, Phys. Rev. 82 (1951).

- [15] F.J.M. Farley, K. Jungmann, J.P. Miller, W.M. Morse, Y.F. Orlov, Y.K. Semertzidis, A. Silenkol, E.J. Stephenson, Phys. Rev.14,1(2003)
- [16] Michael P. Deskevich, Phys. Rev. A. 73, 062108 (2006)
- [17] S.R.Bickman, Progress Towards a Measurement of the Electric Dipole Moment of the Electron using PbO, PhD Thesis Yale University, December 2007
- [18] Jonathan James Hudson, Measuring the electric dipole moment of the electron with YbF molecules, PhD thesis, University of Sussex, September 2001.
- [19] Ruth Durrer, Mecanique Quantique II, Université de Geneve, 2005.
- [20] S. Y. Buhmann, Enhancement factor for the electron electric dipole moment in Gadolinium, PhD Thesis University of New South Wales.
- [21] B.V.Vasil'ev and E.V.Kolycheva, Phys. Rev.21 (september 1977)
- [22] A C Vutha et al, Phys.Rev. 43 (2010)
- [23] B. C. Regan, E. D. Commins, C. J. Schmidt and D. DeMille, Phys. Rev. Lett. 88, 7 (2002)
- [24] G. Feinberg, Phys.Rev. 112, 5 (1958)
- [25] A C Vutha, W C Campbell, Y V Gurevich, N R Hutzler, M Parsons, D Patterson, E Petrik, B Spaun, J M Doyle, G Gabrielse and D DeMille, phys.Rev. 2412, 2 (6 Nov 2010).
- [26] Nouredine Zettili, Quantum Mechanics Concepts and Application, WILEY.
- [27] David Griffiths Reed College, Introduction to Elementary Particles, JOHN WILEY.
- [28] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics Non-relativistic Theory Volume 3, PERGAMON PRESS.
- [29] D.Sivoukhine, Cours De Physique Générale Physique Atomique Et Nucléaire première partie, Edition Mir.MOSCOU.

- [30] J.Hladik, M.Chrysos et P.E Hladik, *Mécanique Quantique ; Atomes et molécule Applications Technologique*.
- [31] B.H.Bransden and C.J.Joachain, *Physics or atoms and molecules*.
- [32] V.V. Flambaum and J.S.M. Ginges, *The nuclear Schiff moment and time invariance violation in atoms*, University of New South Wales, 2008.
- [33] Eugene D. Commins and J. David Jackson, David P. DeMille, *Am. J. Phys.Rev.* 75, 6 (June 2007).
- [34] P. G. H. Sandars, *Phys.Rev.* 22, 3 (15 August 1966).
- [35] P. G. H. Sandars, *Phys.Rev.*14, 3 (1 February 1965).
- [36] L.I.SCHIFF, *Phys..Rev.*132, 5 (1963).
- [37] T. Asaga, T. Fujita and M. Hiramoto, *Phys.Rev.* 106, 6 (December 2001).