HAL
open science

Etude des états métastables dans les ions lourds multichargés

Philippe Patté

To cite this version:

Philippe Patté. Etude des états métastables dans les ions lourds multichargés. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2002. Français. NNT : . tel-00006372

HAL Id: tel-00006372

https://theses.hal.science/tel-00006372v1

Submitted on 4 Jul 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LABORATOIRE
KASTLER BROSSEL

Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie

Spécialité : Physique Atomique

présentée par

Philippe PATTÉ

pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie

Sujet de la Thèse :

Etude des états métastables dans les ions lourds multichargés

Soutenue le 9 septembre 2002 devant le jury composé de :

M. A. MAQUET	Président
M. P. INDELICATO	Directeur de thèse
M. J.-P. DESCLAUX	Rapporteur
Mme E. LINDROTH	Rapporteur
M. F. COSTA PARENTE	Examinateur
M. O. GORCEIX	Examinateur

A AUDREY et à mes PARENTS

Remerciements

Je remercie mon directeur de thèse, Paul Indelicato, pour ses idées judicieuses et pour l'intérêt constant porté à mon travail.

Je tiens également à remercier F. Parente et J.-P. Santos pour leur accueil à l'Institut de Physique Atomique de Lisbonne et pour l'attention qu'ils ont manifestée pour mes recherches.

Je tiens à exprimer ma gratitude à J.-P. Desclaux, O. Gorceix, E. Lindroth et A. Maquet d'avoir bien voulu faire partie du jury.

De même, je remercie E.-O. Lebigot pour les nombreuses discussions sur la QED, B. Manil pour ces précieux renseignements concernant les expériences en cours ainsi que G. Rodrigues pour ses nombreux conseils concernant l'utilisation du programme MDFGME.

Enfin, je remercie le réseau EUROTRAP qui a permis le financement de cette thèse.

Table des matières

1 Introduction historique **1**

1.1 Mécanique Quantique Relativiste et Electrodynamique Quantique . . . 1

1.1.1 Première période : Espoir de trouver une Théorie Quantique Relativiste à un nombre fixé de particules 1

1.1.2 Seconde période : Naissance de la Théorie Quantique des Champs . . . 7

1.2 Physique Atomique . . . 11

1.2.1 L'Electrodynamique Quantique appliquée aux états liés : la BSQED . . . 12

1.3 Le problème à plusieurs corps en Physique Atomique . . . 16

1.3.1 Cas Classique . . . 17

1.3.2 Cas relativiste . . . 20

1.4 Conclusion . . . 24

2 Problèmes théoriques de l'étude relativiste des atomes à plusieurs électrons **25**

2.1 Introduction . . . 25

2.2 Atomes à un électron relativiste . . . 26

2.2.1 L'équation de Dirac hydrogénoïde . . . 26

2.2.2 Les effets de l'Electrodynamique Quantique dans la structure atomique . . . 31

2.3 Atomes à plusieurs électrons . . . 33

2.4 La recherche d'un hamiltonien pour le problème à plusieurs corps relativistes . . . 34

2.4.1 Le problème du continuum négatif et l'hamiltonien sans-paire . . . 34

2.4.2 Conséquences . . . 35

2.4.3 La réponse de la BSQED . . . 36

2.4.4 Obtention de l'hamiltonien sans-paire à partir de la BSQED . . . 37

2.4.5 Le choix des projecteurs 39
2.4.6 L'interaction électron-électron 40
2.4.7 Les différentes corrections à l'énergie des électrons liés dans un atome à plusieurs électrons 42

3 La méthode Dirac-Fock multi-configurationelle (MCDF) 44
3.1 Introduction 44
3.2 La méthode Dirac-Fock 46
3.2.1 Le Principe Variationnel 46
3.2.2 Les trois étapes des calculs de structures atomiques . . 47
3.2.3 Première étape : Détermination de F 49
3.2.4 Deuxième étape : Les équations de Dirac-Fock 51
3.2.5 De meilleures approximations 53
3.3 La Méthode MCDF 54
3.3.1 La corrélation dans les atomes complexes 54
3.3.2 Les fonctions d'onde 54
3.3.3 La Fonctionnelle Energie E' 54
3.4 Les équations intégro-différentielles de la méthode MCDF . . . 55
3.4.1 Les équations radiales 55
3.5 Conclusion 56

4 Influence de la corrélation sur l'énergie de liaison totale dans les ions lourds 57
4.1 Introduction 57
4.2 Les résultats 57
4.2.1 L'influence des effets relativistes et à plusieurs corps sur les énergies de liaison totales du césium et d'autres ions fortement chargés 57
4.2.2 Applications des méthodes MCDF et RMBPT à des ions piégés 62
4.2.3 Les calculs systématiques des énergies de liaison atomiques totales 78
4.3 Conclusion 84

5 Influence de la corrélation sur les probabilités de transition dans les gaz rares (Ne, Ar, Kr et Xe) 85
5.1 Introduction 85
5.2 Méthode et options de calculs 85
5.3 Les résultats 86
5.3.1 Le néon 86

5.3.2 L'argon 89
5.3.3 Le krypton 91
5.3.4 Le xénon 92
5.4 Discussion 93
5.5 Conclusion 93

6 Transitions à 2-photons dans les atomes à N-électrons 95
6.1 Introduction 95
6.2 Transitions à deux photons dans la méthode MCDF 96
6.2.1 Introduction 96
6.2.2 Transitions à 2 photons 96
6.2.3 Expression finale pour $\mathbf{L_1}$ et $\mathbf{L_2}$ fixés 105
6.2.4 Conclusion 105
6.3 Expression mathématique du taux de désintégration spontanée relativiste dans les systèmes héliumoïdes 106
6.3.1 Introduction 106
6.3.2 L'article 106

7 Atomes Exotiques 112
7.1 Détermination de la masse du pion chargé et de standards de calibration en énergie basés sur les transitions X des atomes pioniques 112
7.1.1 Introduction 112
7.1.2 Expérience 113
7.1.3 Interaction pion-électron : Terme de Breit 114
7.1.4 Effet de l'écrantage 157
7.1.5 Détermination de la masse du pion chargé 159
7.2 Les cascades muoniques dans les atomes et les molécules de bas Z, isolés 168
7.2.1 Introduction 168
7.2.2 Article 168

8 Conclusion et Perspectives 180

Annexes 181

A Unités atomiques 182

B Rappels de Relativité Restreinte : Métrique et Notations 183

C Les harmoniques sphériques tensorielles **186**
C.1 Propriétés générales des harmoniques sphériques tensorielles 186
C.2 Les harmoniques sphériques spinorielles 187
C.3 Les harmoniques sphériques vectorielles 187

Bibliographie **188**

Chapitre 1

Introduction historique

La physique atomique est à l'origine de la mécanique quantique. Avec l'augmentation de la précision des résultats expérimentaux, l'importance des effets relativistes est devenue de plus en plus évidente. Par voie de conséquence, la physique atomique est également à la base du développement de la mécanique quantique relativiste (RQM) et de la théorie quantique des champs, en particulier de l'électrodynamique quantique (QED).

Ce chapitre est composé de deux parties. Dans la première partie, nous rappellerons les développements de la mécanique quantique relativiste puis de l'électrodynamique quantique. Cette mise au point est essentielle car ils représentent les fondements de la théorie atomique actuelle. Dans la seconde partie, nous verrons comment les outils modernes de la physique atomique ont progressé depuis 1950, à savoir l'électrodynamique quantique des états liés et les différentes approches du problème à N-corps relativistes.

1.1 Mécanique Quantique Relativiste et Electrodynamique Quantique

1.1.1 Première période : Espoir de trouver une Théorie Quantique Relativiste à un nombre fixé de particules

La mécanique ondulatoire, évincée de 1925 à 1926 par la mécanique des matrices de Heisenberg, Born, Jordan et Pauli, fut remise sur le devant de la scène par Schrödinger en 1926. Celui-ci, dans un article [1], écrivit sa fameuse équation qui constitue une formulation mathématique de la mécanique des ondes. Equation qui, pour un électron plongé dans un potentiel $V(\vec{r}, t)$, se

formule de la façon suivante :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t), \tag{1.1}$$

avec Ψ la fonction d'onde de l'électron, m la masse de l'électron et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ où h est la constante de Planck.

Cette formule était issue de l'hypothèse que fit de Broglie en 1923 [2] : tout comme les photons, les particules matérielles pouvaient être décrites par des ondes. Pour une particule libre, les relations entre les caractéristiques corpusculaires (E et $\vec{p}$) et ondulatoires (ν et λ) sont :

$$\nu = \frac{E}{h}$$
$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

En supposant que toute orbite fermée contenait un nombre entier de longueur d'onde λ, de Broglie retrouva les conditions de l'ancienne théorie des quanta appliquée à la physique de l'atome de Bohr et Sommerfeld. Pour mémoire, nous rappelons que le modèle de Sommerfeld est une généralisation de celui de Bohr. En effet, Sommerfeld prit en compte la relativité restreinte ce qui eut pour conséquence que les orbites sont désormais elliptiques. En effectuant des développements limités en $\frac{v}{c}$, il obtint pour l'énergie l'expression suivante :

$$E_{nk} = E - mc^2 = -Rhc\frac{Z^2}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2}\left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4}\right) + ...\right], \tag{1.2}$$

avec E l'énergie totale de l'électron, n le nombre quantique principal, $k = l + 1$, R la constante de Rydberg, h la constante de Planck, Z la charge nucléaire, α la constante de structure fine et c la vitesse de la lumière. La dégénérescence en n des niveaux est désormais levée et une structure fine des niveaux de l'hydrogène apparaît [3].
Durant l'été 1926, Davisson et Germer confirmèrent expérimentalement l'hypothèse de De Broglie avec la diffraction des électrons par les cristaux.

On peut alors se demander pourquoi l'équation (1.1) que donna premièrement Schrödinger était non relativiste alors que la mécanique ondulatoire puise ses origines dans la relativité restreinte. En fait, Schrödinger trouva d'abord une équation relativiste mais devant les problèmes que celle-ci soulevait, en particulier de mauvaises valeurs pour la structure fine de l'hydrogène, il préfèra se limiter à l'approximation non-relativiste qui permettait d'obtenir des valeurs correctes mais pas la structure fine !

Parallèlement, cette équation fut redécouverte indépendamment par Klein et Gordon. Elle prend, pour un électron plongé dans un potentiel électrostatique $\frac{e^2}{4\pi r}$ [1] (cas de l'atome d'hydrogène), la forme suivante :

$$\left[\left(E + \frac{e^2}{4\pi r}\right) - c^2\hbar^2\triangle - m^2c^4\right]\Psi(\vec{x}) = 0 \tag{1.3}$$

En plus de ne pas donner la bonne structure fine de l'hydrogène, cette équation conduisait à des énergies négatives et à une densité de probabilité non-définie positive.

Pour Dirac, c'est là que se trouvait la solution. Il se mit donc à chercher une équation d'onde relativiste menant à une densité de probabilité positive comme avec l'équation de Schrödinger.
Il s'aperçut que si l'équation de Klein-Gordon pouvait produire des probabilités négatives, c'est qu'elle était du deuxième ordre par rapport au temps. Il fallait donc remplacer l'équation de Klein-Gordon par une équation du premier ordre par rapport au temps, mais également par rapport aux coordonnées afin d'assurer la covariance. Toutefois, cette équation devait être en accord avec l'équation libre de Klein-Gordon qui ne traduit que la relation énergie-impulsion $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$. Dirac obtint cette équation[2] pour un électron :

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (-i\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + \beta m)\Psi, \tag{1.4}$$

où Ψ est désormais une matrice colonne à 4 composantes d'un genre particulier appelée Bi-spineur de Dirac et où $\vec{\alpha}$ et β sont des matrices hermitiennes anticommutatives dont le carré vaut I. On vérifie facilement que chacune des composantes de Ψ satisfait à l'équation de Klein-Gordon, à condition que les matrices α_i et β obéissent aux relations suivantes :

$$\{\alpha_i, \alpha_k\} = 2\delta_{ij} \tag{1.5}$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0 \tag{1.6}$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = I \tag{1.7}$$

Il existe plusieurs représentations des matrices de Dirac, toutes reliées par des transformations unitaires. La représentation la plus couramment utilisée en physique atomique est la suivante :

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

[1] Système d'unités de Gauss.

[2] Dans la suite de cette section, nous utilisons le système d'unité où $c = \hbar = 1$.

Les σ^i sont les matrices de Pauli et I la matrice unité 2×2.

Pour étudier le comportement d'un électron dans un champ électromagnétique extérieur arbitraire caractérisé par un quadripotentiel $A^\mu = \{\Phi, \vec{A}\}$, Dirac suiva la procédure habituelle du couplage minimal qui est imposée pour assurer l'invariance de jauge du champ électromagnétique, c'est-à-dire :

$$i\frac{\partial}{\partial t} \to i\frac{\partial}{\partial t} - e\phi \quad \text{et} \quad -i\vec{\nabla} \to -i\vec{\nabla} - e\vec{A} \tag{1.9}$$

On a alors :

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\vec{\alpha}.(-i\vec{\nabla} - e\vec{A}) + e\phi + \beta m\right)\Psi \tag{1.10}$$

$$= (\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta m)\,\Psi + \left(-e\vec{\alpha}.\vec{A} + e\phi\right)\Psi$$
$$= (H_0 + H_{int})\,\Psi$$

A la limite non-relativiste, on retrouve l'équation de Pauli que celui-ci, à partir de l'équation de Schrödinger, avait introduite pour rendre compte de la structure fine de l'hydrogène :

$$i\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left[\frac{(\vec{\sigma}.\vec{\pi})^2}{2m} + e\phi\right]\Phi, \tag{1.11}$$

où Φ est maintenant un spineur à deux composantes.
Dirac montra que dans un champ central (cas de la physique atomique), la conservation du moment cinétique prend la forme suivante :

$$\left[H, -i\vec{r} \times \vec{\nabla} + \frac{\vec{\Sigma}}{2}\right] = 0, \tag{1.12}$$

où l'on reconnaît l'opérateur moment cinétique orbital $(-i\vec{r}\times\vec{\nabla})$ et l'opérateur du moment cinétique intrinsèque $\vec{S} = \frac{\vec{\Sigma}}{2}$ avec $\vec{\Sigma}$ version 4×4 des matrices de Pauli. En itérant l'équation (1.10), Dirac trouva une équation analogue à celle de Klein-Gordon en présence d'un champ extérieur :

$$\left[(i\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi)^2 - (i\vec{\nabla} + e\vec{A})^2 - m^2\right]\Psi(\vec{x}, t) = 0, \tag{1.13}$$

mais avec désormais la présence de deux termes supplémentaires :

$$\left[e\vec{S}.\vec{B} - ie\vec{\alpha}.\vec{E}\right]\Psi, \tag{1.14}$$

c'est-à-dire :

$$\left[(i\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi)^2 - (i\vec{\nabla} + e\vec{A})^2 + e\vec{S}.\vec{B} - ie\vec{\alpha}.\vec{E} - m^2\right]\Psi(\vec{x},t) = 0 \qquad (1.15)$$

Pour un électron se déplaçant avec $v \ll c$, on retrouve la valeur de Goudsmit et Uhlenbeck (1926) pour le moment magnétique. Cette valeur, plus le fait que la théorie est relativiste par nature, assure de trouver un déplacement de structure fine en accord (à l'ordre $\alpha^4 mc^2$) avec celui trouvé par Heisenberg, Jordan et Darwin. Par la suite, Darwin et Gordon obtinrent la formule exacte pour les niveaux d'énergie de l'hydrogène dans la théorie de Dirac. Lorsqu'on développe cette formule à l'ordre trois en série de α^2, ces termes sont en accord avec ceux trouvés par Sommerfeld (1.2) . Dirac avait donc atteint son but : une formulation relativiste avec des probabilités positives. De plus, à partir de cette équation, on peut obtenir une équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{j} = 0, \qquad (1.16)$$

où $\rho = |\Psi|^2$ peut être interprété comme une densité de probabilité
et $\vec{j} = c\Psi^\dagger\vec{\alpha}\Psi$ comme une densité de courant.

Cependant, il restait un problème et non des moindres, celui de l'existence d'énergies négatives. En effet, à un $\vec{p}$ donné sont associées quatre solutions :

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2} \quad \text{avec} \quad J_z = \mp\frac{1}{2}$$
$$E = -\sqrt{\vec{p}^2 + m^2} \quad \text{avec} \quad J_z = \mp\frac{1}{2}$$

Ce problème était également présent dans l'équation de Klein-Gordon, ainsi qu'en physique classique relativiste où l'on suppose simplement que les seuls états physiques possibles sont ceux d'énergie positive. Cependant, ce problème est beaucoup plus ennuyeux en mécanique quantique relativiste comme le montra Dirac en 1928. En effet, l'interaction d'un électron avec un photon peut entraîner une transition au cours de laquelle l'électron peut tomber dans un état d'énergie négative, ceci remettant en cause la stabilité de la matière. En 1930, s'appuyant sur le *Principe d'exclusion*, Dirac proposa une solution : tous les états d'énergie négative sont occupés, empêchant ainsi un électron d'y tomber. Le concept de mer de Dirac était né. Lorsqu'un trou se produisait dans cette mer, cela se traduisait par l'apparition d'une particule de charge positive et d'énergie positive. Comme à cette époque les seules particules connues de charges positives étaient les protons, Dirac identifia donc

au départ ces trous à des protons. Mais cette identification conduisit à des problèmes de stabilité de la matière si bien qu'en 1931 il suggéra que les trous devaient être de nouvelles particules de charge positive et de même masse que l'électron. Cette hypothèse fut confirmée expérimentalement en 1932 par Anderson qui découvrit dans les rayons cosmiques la présence de particules de même masse que les électrons mais de charge opposée. Ces particules, appelées depuis lors positrons, se révélèrent alors être les bons candidats pour représenter les trous dans la mer de Dirac.

Dirac avait donc établi une équation covariante de Lorentz qui, d'une part, reproduisait de manière correcte un certain nombre de résultats expérimentaux (spin et moment magnétique de l'électron ainsi que la structure fine de l'hydrogène) et possédait une densité de probabilité définie positive et qui, d'autre part, apportait une nouvelle conception de la matière (l'anti-matière constituée par les trous) avec la découverte d'Anderson comme confirmation.

Dans la théorie de Dirac, le vide a une charge et une énergie infinies. Mais puisque toutes les mesures représentent des fluctuations finies de l'énergie et de la charge par rapport au vide, cela conduit à une théorie acceptable.

Toutefois, la nécessité d'introduire la notion de trous dans la théorie de Dirac remit en question l'interprétation de son équation comme une équation à particule unique. En effet, le principe d'incertitude autorise des fluctuations dans cette mer qui se traduisent par l'apparition de paires virtuelles électron-trou (positron). On est donc en présence d'un problème à plusieurs corps qui, en mécanique quantique classique, est traité dans le cadre de la seconde quantification. L'équation de Schrödinger y est désormais traitée comme une équation de champ classique, la fonction d'onde étant ce champ.

Qu'en est-il des résultats d'énergie négative de l'équation de Klein-Gordon ? Dans ce cas, l'idée brillante de Dirac ne fonctionne pas car cette équation s'applique à des particules de spin nul (boson) [3]. Nous verrons par la suite que la théorie quantique des champs donne une interprétation consistante de ces deux cas.

[3] Lorsque la vitesse de la particule est telle que $v \ll c$, on retrouve l'équation de Schrödinger pour une particule libre. Comme le type de particule décrit par une équation d'onde ne dépend pas du fait que celle-ci soit relativiste ou non-relativiste, nous en déduisons que l'équation de Klein-Gordon décrit des particules de spin nul ! [4]

1.1.2 Seconde période : Naissance de la Théorie Quantique des Champs

C'est du fait d'un accident historique que les propriétés corpusculaires des particules furent les premières à être observées plutôt que leurs propriétés ondulatoires, comme ce fut le cas pour les photons [5]. En effet, à l'époque de la découverte de l'électron par Thomson en 1897, la croyance dans les idées de la physique classique était très forte et dans ce cadre, matière et rayonnement sont deux concepts bien distincts. On aurait alors eu bien des difficultés à accepter qu'un électron puisse se comporter à la fois comme une onde et comme une particule. Cette idée sera à la base du principe de complémentarité énoncé par Bohr [6], notion qui n'est toujours pas des plus faciles à accepter de nos jours. Ainsi que le disait Bohr : *Anyone who is not shocked by the quantum theory does not understand it.*

C'est Einstein qui sera à l'origine de cette révolution. Planck avait déja posé les bases pour un telle interprétation lors de son étude sur le rayonnement d'un corps noir [7]. Il émettait l'hypothèse très contreversée que les échanges d'énergie entre le rayonnement et les parois se font par paquets. Einstein, de son côté, ira beaucoup plus loin en affirmant que le rayonnement se comporte comme une assemblée de paquets d'énergie [8], appelés photons par la suite. Avec les photons, les physiciens avaient désormais des particules se comportant comme des champs ou des corpuscules et il était alors naturel de prendre modèle sur la théorie du rayonnement pour l'élaboration d'une théorie quantique des champs. C'est ce que firent en 1926 Born, Heisenberg et Jordan [9] en appliquant leurs nouveaux concepts de la mécanique des matrices au champ du rayonnement libre. En se limitant au cas unidimensionnel, ils trouvèrent un hamiltonien identique à celui d'une corde vibrante dont les extrémités sont fixes :

$$H = \frac{1}{2}\int_0^L \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 + c^2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right] dx \tag{1.17}$$

En appliquant la procédure habituelle consistant à développer le champ suivant ses modes propres, ils obtinrent :

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t)\sin\left(\frac{\omega_k x}{c}\right) \tag{1.18}$$

$$\omega_k = \frac{k\pi c}{L} \tag{1.19}$$

(Pour la corde, ce champ est constitué par les petits déplacements autour de la position d'équilibre en chacun des points de cette dernière. On peut trouver

un très bon traitement de la quantification de la corde non-relativiste dans la réfèrence [10]). Ils trouvèrent donc une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques qu'ils avaient déjà bien étudiée dans le cadre de la mécanique des matrices, soit :

$$H = \frac{L}{4}\sum_{k=1}^{\infty}\left[\dot{q}^2(t) + \omega_k^2 q_k^2(t)\right] \tag{1.20}$$

On peut alors écrire H en se servant des opérateurs de création $a^\dagger$ et d'annihilation a introduits dans l'étude des oscillateurs harmoniques, ce qui conduit pour H à l'expression suivante :

$$H = \sum_k \hbar\omega_k(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}) \tag{1.21}$$

L'état propre le plus général d'un tel hamiltonien est de la forme :

$$|n_{k_1}, n_{k_2}, \cdots, n_{k_m}, \cdots\rangle = \frac{\left(a_{k_1}^\dagger\right)^{n_{k_1}}}{\sqrt{n_{k_1}!}}\frac{\left(a_{k_2}^\dagger\right)^{n_{k_2}}}{\sqrt{n_{k_2}!}}\cdots|0\rangle \tag{1.22}$$

Cela signifie que tous les états peuvent être construits à partir du vide de la théorie $|0\rangle$. Un tel état avec un nombre défini de quanta dans chacun des états possibles est dénommé état de Fock. L'espace formé par l'action sur $|0\rangle$ d'un nombre de fois quelconque des opérateurs de création pour n'importe lequel des modes est appelé Espace de Fock. La base d'un tel espace contient donc tous les états possibles $|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots\rangle$, où les n_k représentent le nombre de quanta présent dans le mode k [11]. Grâce aux opérateurs de création et d'annihilation, on passe d'un état à un autre.

Born, Heisenberg et Jordan appliquèrent donc ce formalisme au cas d'un rayonnement libre interagissant avec un atome afin de retrouver les coefficients d'Einstein [12].

Mais en 1927, ce sera finalement Dirac qui, en développant le vecteur potentiel $\vec{A}(\mathbf{x}, t)$ en ses modes propres, obtiendra la relation entre les coefficients d'Einstein :

$$A(\beta \to \alpha) = \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)\nu^3 B(\beta \to \alpha), \tag{1.23}$$

où $A(\beta \to \alpha)$ est le taux d'émission spontanée entre les états β et α et où $uB(\beta \to \alpha)$ avec $u = \left(\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\right)\nu^3$ est le taux d'émission induite.

Dirac obtint cette relation sans faire appel à la Thermodynamique comme le fit Einstein. Devant les succès de la méthode appliquée au champ électromagnétique, elle fut appliquée aux autres champs. Cela signifie que l'on peut donc considérer les équations de Klein-Gordon et de Dirac comme

des équations de champs classiques et les soumettre à une quantification. Les excitations de ces champs possèdent des propriétés que l'on peut associer à une particule tels l'énergie, l'impulsion et le moment cinétique. Finalement, ce sera Dirac qui arrivera en 1928 à une formulation correcte de l'interaction entre particules chargées et photons, posant ainsi les bases de l'électrodynamique quantique (QED). Dans ce formalisme, les fonctions d'onde (c-number) sont devenues des opérateurs (q-number) qui créent et détruisent des particules. Dans un tel formalisme, le champ de Dirac s'écrit :

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{k}^{+} \hat{a}_k u_k(x) + \sum_{k}^{-} \hat{b}_k^{\dagger} u_k(x), \tag{1.24}$$

les signes + et - au-dessus des sommes faisant référence aux modes d'énergie positive et négative, nous avons donc :

$$\begin{aligned} u_k(x) &= u_k(\mathbf{x}) e^{-iw_k t} \qquad \text{si} \qquad w_k > 0 \\ u_k(x) &= u_k(\mathbf{x}) e^{+iw_k t} \qquad \text{si} \qquad w_k < 0 \end{aligned} \tag{1.25}$$

On peut donc se demander en quoi la théorie quantique des champs résoud le problème des énergies négatives ? Pour cela, il faut faire appel à une idée associée aux noms de Stückelberger [13] et de Feynman ([14]-[15]) qui interprétèrent un électron d'énergie négative remontant le temps comme un positron d'énergie positive évoluant vers le futur. Cette constatation vient de : $e^{-iw_k t} = e^{-i(-w_k)(-t)}$.

Au début des années trente, Heisenberg et Pauli ([16]-[17]) commencèrent à étudier les corrections d'ordre élevé et s'aperçurent que les quantités obtenues étaient infinies. Ceci fut confirmé dans le calul, effectué par Oppenheimer [18], de l'énergie propre d'un électron lié. Donc, si les premiers temps furent euphoriques, les problèmes qui existaient déjà en électrodynamique classique réapparurent. Dans ce cadre, en effet, si l'on s'intéresse à l'énergie propre classique de l'électron, on aboutit à une quantité infinie, problème déjà noté par Lorentz. Au deuxième ordre de la théorie des perturbations, par exemple, le déplacement en énergie d'un électron dans un niveau n de l'atome d'hydrogène est :

$$\triangle E_n = \sum_{m,\lambda} \int d^3k \frac{\langle n|H^{'}|m;\vec{k},\lambda\rangle\langle m;\vec{k},\lambda|H^{'}|n\rangle}{E_n - E_m - \omega_k}, \tag{1.26}$$

où la somme et l'intégration portent sur tous les états électroniques (m) et photoniques ($\vec{k},\lambda$) intermédiaires et où $H^{'}$ est le terme représentant l'interaction. Ce calcul aboutit à une quantité infinie provenant de l'intégration

lorsque $k \to \infty$. Ce genre d'infini est appelé divergence Ultra-Violette puisqu'il provient de la présence dans les états intermédiaires de photons de très courte longeur d'onde (très grande énergie). Les physiciens eurent alors l'idée d'éliminer tous les états intermédiaires responsables de cette divergence en introduisant un paramètre de coupure . Tous les états tel que $k > \frac{1}{a}$ quand $a \to 0$ étaient éliminés. Après plusieurs essais, Weisskofp [19] montra que l'énergie propre de l'électron se comportait comme :

$$m_{em} = \frac{3\alpha}{2\pi} m \ln\left(\frac{\hbar}{mca}\right) \tag{1.27}$$

quand $a \to 0$. Par la suite, il montra que ce comportement en $\ln a$ était vrai à tous les ordres.

En 1933, Dirac [20] mit en évidence un autre type de divergence dont l'origine se trouve dans la théorie des trous. Le vide, qui dans ce cas est composé de la mer d'électrons d'énergie négative, est en effet le siège de fluctuations se traduisant par l'apparition et la disparition continuelles de paires électron-positron. Donc, un électron plongé dans un tel milieu aura tendance à attirer les positrons et à repousser les électrons des paires virtuelles si bien que la charge d'un électron est écrantée et l'on parle alors d'électrons habillés. Ce sont ces derniers que l'on observe. Ce processus porte le nom de Polarisation du Vide (V.P.).

Il reste une dernière divergence appelée divergence Infrarouge. Elle provient du fait que des photons de très basse énergie ne sont pas observés par les détecteurs mais ils doivent tout de même être pris en compte au cours des calculs.

Durant les années trente, les physiciens cohabitèrent avec ces infinis et se mirent même à la recherche d'autres théories. J.A. Wheeler [21], par exemple, pensait que la théorie devait uniquement reposer sur des quantités observables telle la matrice S dont les éléments sont constitués par les amplitudes des différents phénomènes susceptibles de se produire lors d'une réaction. Mais à la même époque, une idée commençait à percer selon laquelle tous les infinis pouvaient être absorbés dans une redéfinition, une renormalisation des paramètres de la théorie. En effet, comme on l'a déjà vu dans le cas de la polarisation du vide, on ne mesure jamais la charge d'un électron nu (bare-electron) mais celle d'un électron habillé (dressed-electron).

Mais il faudra attendre 1947 et les travaux de W.E. Lamb et R.C. Retherford [22]. Ces derniers, bénéficiant des progrès importants réalisés au cours de la seconde guerre mondiale dans le domaine des radars, annoncèrent leur mesure du déplacement du niveau $2s_{1/2}$ par rapport au niveau $2p_{1/2}$ dans l'hydrogène, maintenant connu sous le nom de déplacement de Lamb. Ce résultat était en totale contradiction avec la théorie de Dirac selon laquelle

ils doivent avoir la même énergie. Le déplacement de Lamb montrait l'importance de tenir compte des corrections d'ordre supérieur qui jusqu'alors étaient écartées puisque infinies. Pour la petite histoire, c'est dans le train qui le ramenait d'une conférence que Bethe [23] fit un calcul non-relativiste (il n'inclut pas les états intermédiaires positroniques) de l'énergie propre de l'électron dans le champ coulombien d'un proton, cas qui correspond à l'électron de l'atome d'hydrogène, et il trouva une valeur très proche de celle expérimentale (1057 Mhz). Le premier calcul relativiste de l'énergie propre d'un électron lié fut effectué par N.M. Kroll et W.E. Lamb [24]. Au cours de leur calcul, ils trouvèrent que la correction au moment magnétique de l'électron (le '$g-2$') devait être celle mesurée expérimentalement par P. Kush et H.M. Foley [25] ainsi que par J.E. Nafe et E.B. Nelson [26]. Cette valeur du moment magnétique anormal de l'électron coïncidait avec la valeur théorique que Schwinger [27] avait trouvée.
Il fallait donc arriver à obtenir les informations physiques contenues dans ces infinis. Finalement, les travaux de Schwinger, Feynman et Tomonaga montrèrent comment obtenir des résultats à partir de calculs de QED d'ordre élevé, posant ainsi les bases de la théorie de la renormalisation sous sa forme moderne. A l'occasion de ce travail et afin de faciliter le calcul des termes successifs des développements perturbatifs, Feynman introduisit des diagrammes désormais utilisés dans de nombreux domaines de la physique. Ils sont appelés diagrammes de Feynman. Il est à noter que l'origine de ces infinis est très profonde puisqu'elle provient de notre mauvaise connaissance de la structure de l'espace-temps à très courtes distances $x \to 0$ ou hautes énergies $k \to \infty$. Jusqu'à la fin de sa vie, Dirac ne sera pas satisfait par la solution que proposait la renormalisation aux problèmes d'infinis et resta persuadé qu'une nouvelle théorie verrait le jour permettant ainsi de se passer des techniques de la renormalisation qu'il considérait comme artificielles.

Depuis cette époque, l'électrodynamique quantique est la théorie quantique des champs la plus précise dont nous disposons. Toutes les autres théories, telles la théorie de l'interaction faible et la théorie de l'interaction forte, ont été construites en prennant pour modèle la QED.

1.2 Physique Atomique

Comme indiqué en début de chapitre, nous allons étudier dans cette seconde partie la nouvelle approche de la physique atomique issue de l'élaboration de la mécanique quantique relativiste et de l'électrodynamique quantique.

Jusqu'en 1949, le développement de ces deux derniers domaines s'est effectué parallèlement à celui de la physique atomique. D'une part, l'équation de Dirac fut développée afin de trouver une équation d'onde relativiste donnant le bon spectre de l'hydrogène, en particulier sa structure fine. D'autre part, la théorie de l'électrodynamique quantique a vu le jour lorsque les physiciens ont cherché à obtenir une description de l'interaction de particules chargées avec un champ électromagnétique également quantifié, par oppositon à la méthode semi-classique où seulement les particules sont quantifiées et le champ électromagnétique traité de façon classique. Une fois de plus, les premières applications concernèrent l'atome d'hydrogène. Forts de ces nouveaux outils, les physiciens qui travaillaient dans le domaine de la physique atomique voulurent les rendre applicables à des atomes plus complexes que l'hydrogène. En effet, la physique atomique donne des informations sur les propriétés et l'interaction des atomes et doit donc tenir compte des effets relativistes, des effets de l'électrodynamique quantique et des effets à plusieurs corps. Par conséquent, de nouvelles formulations de l'électrodynamique quantique et du problème à N-corps sont apparues tenant compte du fait qu'elles devaient permettre d'obtenir des résultats numériques pouvant être confrontés aux résultats expérimentaux de plus en plus précis.

1.2.1 L'Electrodynamique Quantique appliquée aux états liés : la BSQED

Lorsqu'on parle de théorie quantique des champs, on pense généralement au domaine des hautes énergies. Mais les outils de la théorie des champs se sont révélés très utiles dans de nombreux autres domaines (comme la mécanique statistique) moyennant quelques aménagements. Tel est le cas en physique atomique. De nos jours, la structure de l'électrodynamique quantique telle qu'elle est utilisée en physique atomique correspond à peu près à celle de la fin des années quarante (époque de la formulation des méthodes de renormalisation) et des années cinquante qui étendirent la théorie aux états liés .

En 1951 paraît l'article de Furry [28] posant les bases d'une nouvelle représentation de l'électrodynamique quantique adaptée à l'étude des états liés. Dans la représentation de Furry, le potentiel nucléaire entre dès le début

dans la fonction d'onde et le propagateur [4] :

$$\left[-ic\vec{\alpha}.\vec{\nabla} + V(\vec{x}) + (\beta - 1)c^2 - E_n\right]\phi_n(\vec{x}) = 0, \tag{1.28}$$

avec :

$$\phi_n(x) = \phi_n(\vec{x})e^{-iE_n t} \tag{1.29}$$

Le potentiel dans (1.28) est le potentiel coulombien du noyau, mais il peut aussi être un potentiel effectif dans le cas d'atomes à plusieurs électrons. L'opérateur du champ électron-positron a donc la forme suivante :

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{E_n>0} \hat{a}_n\phi_n(x) + \sum_{E_m<0} \hat{b}_m^\dagger\phi_n(x) \tag{1.30}$$

On peut comparer cette équation avec (1.24) où, dans ce cas, les $u_k(x)$ étaient solutions de l'équation libre de Dirac.

Le formalisme de la théorie quantique des champs permet aussi de calculer le déplacement des niveaux d'énergie à partir des éléments de la matrice S. Dans un article de 1951, Gell-Mann et Low [29] donnèrent l'expression du déplacement en énergie, actuellement connue sous le nom de théorème de Gell-Mann et Low. L'expression utilisée est celle symétrisée par Sucher [30] :

$$\triangle E_n = \lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ \lambda \to 1}} \frac{i\varepsilon\lambda}{2}\frac{\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle n|S_{\varepsilon,\lambda}|n\rangle_c}{\langle n|S_{\varepsilon,\lambda}|n\rangle_c}, \tag{1.31}$$

où l'indice c fait référence aux diagrammes connectés, ceux déconnectés n'étant pas pris en compte [31]. Nous renvoyons le lecteur désireux de connaître le formalisme se cachant derrière cette formule (théories des perturbations, branchement adiabatique de la perturbation, Matrice S, Théorème de Wick ...) aux références suivantes [32], [33] , [34] et [35]. Les deux corrections radiatives les plus importantes dans le déplacement des niveaux atomiques sont, premièrement, l'énergie propre (Self-Energy : S.-E.) de l'électron et, deuxièmememt, la polarisation du vide (Vacuum Polarisation : V.P.). Dans le chapitre VII et dans le cas des atomes exotiques, on verra que la polarisation du vide l'emporte sur l'énergie propre.

D'un point de vue purement théorique, toute la théorie relativiste des atomes est contenue dans l'électrodynamique quantique des états liés car elle est issue de la formulation relativiste du problème à N-corps. Mais dans ce cadre, traiter le cas d'atomes à plusieurs électrons est dans la plupart des cas

[4] A partir de maintenant, on utilise le système d'unités atomiques (voir l'Appendice A) dans toutes les équations.

inapplicable sauf pour des systèmes simples très lourds. L'origine de cette difficulté provient de l'approximation utilisée qui porte le nom d'approximation en échelle, ceci étant dû à la forme des diagrammes conservés dans le développement. Dans ce cadre, un diagramme à $n+1$ lignes photoniques est seulement d'ordre $\frac{1}{Z}$ fois plus petit que le diagramme avec n lignes photoniques [36]. Donc, à moins que Z ne soit très grand, l'utilisation directe de la BSQED pour les atomes légers à l'ordre nécessaire afin d'obtenir une précision comparable aux résultats expérimentaux est impossible.

Depuis 30 ans, l'apparition d'accélérateurs et de sources d'ions [37] capables de produire des ions lourds fortement chargés, comme au GSI à Darmstadt (SIS/ESR) et à Livermore (Super Ebit), a ouvert l'étude d'un domaine devenu de nos jours l'un des plus actifs de la physique atomique : la physique atomique des ions lourds de charge positive. Peu de tentatives ont été faites pour utiliser directement la BSQED dans le cas d'ions lourds à deux électrons [38]. Cependant la très grande précision atteinte dans les mesures a stimulé, d'une part, le développement de techniques pour le problème à N-corps relativistes, sujet de la prochaine section, et d'autre part, l'étude d'un domaine encore mal connu, celui de l'électrodynamique quantique en champs forts ([39], [40] et [41]) avec, par exemple, le cas de l'uranium hydrogénoïde. Le champ électrique à la surface du noyau y vaut environ 2.10^{19}V/cm. Dans un tel contexte, l'application de la machinerie habituelle pour l'évaluation des corrections dues à l'électrodynamique quantique, elle-même basée sur la théorie des perturbations et résultant en un développement en α (représentant le nombre de photons virtuels) auquel s'ajoute un développement suivant les puissances de $Z\alpha$ qui rend compte de la présence du champ nucléaire, peut soulever des questions concernant la validité d'une telle approche [42].

Depuis le calcul non-relativiste de Bethe de la correction radiative à l'aide d'un développement en $Z\alpha$ et le calcul relativiste de N.M. Kroll et W.E. Lamb Jr, dont nous avons déjà parlé dans la section 1.2, les calculs des corrections radiatives dans les systèmes hydrogénoïdes se sont multipliés donnant les ordres suivants du développement en $Z\alpha$ (ex. [43]) et la littérature est désormais très abondante.

Il est important de signaler que les calculs de haute précision en BSQED ont un caractère différent par rapport à ceux d'une précision comparable effectués en QED. En effet, dans le cadre de la BSQED, le processus de renormalisation de la série perturbative doit être effectué de façon plus subtile et doit mettre en jeu des soustractions complexes de divergences se chevauchant et s'emboîtant.

La renormalisation en QED est une procédure parfaitement définie bien

que sa mise en œuvre soit longue et complexe. En BSQED, cependant, les calculs de haute précision sont essentiellement non-perturbatifs vis-à-vis du potentiel nucléaire. Bien que ces calculs mettent en jeu des noyaux intégrables pouvant être écrits en fonction des diagrammes de Feynman, des paramètres sans dimensions, en particulier la constante de structure fine α, entrent dans les fonctions d'onde et dans les propagateurs d'une façon non-perturbative. On ne peut donc pas simplement compter les puissances de α présentes dans un noyau intégrable afin de déterminer sa contribution au déplacement énergétique d'un niveau. Généralement, un noyau donné comprend quelques termes principaux ainsi que des séries infinies de termes plus petits. De plus, les noyaux peuvent souvent être groupés de manière à ce que leurs termes principaux s'annulent. Il est important de tenir compte de ceci afin d'éviter de calculer des termes faux d'ordre inférieur. Cela a pour conséquence que l'utilisation de la BSQED ne se fait pas de façon mécanique. Il existe donc plusieurs manières d'obtenir un résultat correct.

Enfin, signalons que le caractère non-perturbatif de la BSQED se traduit par une dépendance non-analytique des développements (apparition de logarithmes). La méthode pour contrer ces difficultés est d'arranger l'expression calculée de manière à séparer la partie analytique et d'isoler les termes d'ordre supérieur.

Le déplacement de Lamb (à une boucle) dû à l'énergie propre (S.-E.) et à la polarisation du vide (V.P.) peut être écrit sous la forme suivante :

$$\triangle E_n = \frac{\alpha\,(Z\alpha)^4}{\pi n^3} F_n(Z\alpha), \tag{1.32}$$

lorsque Z est très grand, la fonction $F_n(Z\alpha)$ doit être évaluée numériquement [44]. En revanche, pour de petites valeurs de Z, celle-ci peut être développée en puissance de $Z\alpha$. C'est une série asymptotique divergente.

Dans le cas où le recul du noyau atomique n'est pas pris en compte, le développement fait intervenir des constantes tout comme le facteur logarithmique $\ln(Z\alpha)^{-2}$. On a alors :

$$\begin{aligned} F_n(Z\alpha) &= A_{40}(n) + A_{41}(n)\ln(Z\alpha)^{-2} + A_{50}(n)(Z\alpha) \\ &+(Z\alpha)^2\left\{G(n,Z\alpha) + A_{41}(n)\ln(Z\alpha)^{-2}\right\} + A_{62}(n)\ln^2(Z\alpha)^{-2} \end{aligned} \tag{1.33}$$

Les fonctions $G(n,Z\alpha) = [G_{SE}(n,Z\alpha) + G_{VP}(n,Z\alpha)]$ d'ordre $\alpha(Z\alpha)^6$ représentent des termes non-logarithmiques ainsi que toutes les corrections d'ordre supérieur. Le calcul des constantes et de ces fonctions a mobilisé de nombreux physiciens ([42] et [45]).

Il ne semble pas y avoir de méthode standard dans l'évaluation des déplacements radiatifs des niveaux d'énergie atomique. La raison provient de l'uti-

lisation du propagateur de Dirac-Coulomb (fonction de Green) qui peut être traité de plusieurs manières.

En ce qui concerne la polarisation du vide, celle-ci peut être considérée comme la correction au potentiel Coulombien que l'électron ressent de la part du noyau atomique. La première contribution non nulle est appelée potentiel de Uehling ([46]-[47]). Les termes suivants furent calculés par Wichmann et Kroll [48] qui ont montré qu'ils pouvaient s'écrire sous la forme d'un potentiel effectif ayant la forme suivante :

$$\mathcal{V}^{(VP)} = \sum_{i=1,j=0}^{\infty} V_{i,2j+1} \tag{1.34}$$

Toutefois, ces derniers n'obtinrent que des estimations et ce sera finalement G. Soff et P. Mohr [49] qui calculèrent la correction exacte de la polarisation du vide.

Si, dans les premiers temps, la précision des résultats expérimentaux permettait aux théoriens de séparer les corrections radiatives des effets de recul dus à la masse finie du noyau, il est désormais nécessaire de ne plus effectuer une telle démarche afin de se rapprocher des résultats expérimentaux de plus en plus précis [50]. Comme nous l'avons signalé précédemment, la physique des ions lourds a conduit aux développements de méthodes pour le problème à N-corps relativistes, sujet de la prochaine section.

1.3 Le problème à plusieurs corps en Physique Atomique

Si en physique on sait traiter les problèmes à deux corps, il en va autrement lorsqu'on aborde des questions mettant en jeu trois corps ou plus. C'est un problème important de la mécanique classique qui est d'ailleurs à l'origine de la théorie du chaos. Bien que la tâche fut difficile, il fallait en physique atomique arriver à trouver un moyen de contourner ce problème si l'on voulait dépasser l'étude de l'hydrogène. C'est-à-dire, mettre au point des méthodes d'approximation à valeurs opérationnelles dont les résultats seraient en accord avec l'expérience.

1.3.1 Cas Classique

Les premières tentatives en mécanique quantique classique sont issues d'un hamiltonien ayant la forme suivante :

$$H_{NR}^{atome} = \sum_{i=1}^{N} h_{NR}(i) + V_{e-e}, \tag{1.35}$$

où V_{e-e} est l'opérateur représentant l'interaction inter-électronique, soit :

$$V_{e-e} = \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{r_{ij}} \tag{1.36}$$

Le passage d'un cas à un électron à celui à plusieurs électrons, c'est-à-dire de :

$$H_{n-r}(1)\Psi(1) = E\Psi(1)$$

à :

$$H_{n-r}^{atome}\Psi(1,2,\cdots,N) = E\Psi(1,2,\cdots,N) \tag{1.38}$$

n'était pas évident.

Approche variationnelle

Ce seront les travaux d'Hylleraas [51] sur l'hélium de 1928 à 1932 qui donneront confiance dans une telle transition. L'idée principale d'Hylleraas est d'avoir reconnu que l'équation de Schrödinger était l'équation différentielle obtenue à partir de la recherche d'un minimun dans un calcul variationnel. En effet, d'un point de vue variationnel, la fonction d'onde normalisée Ψ est celle qui minimise $\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$. Ainsi dans une telle procédure, au lieu de rechercher Ψ par l'intermédiaire de l'équation de Schrödinger, on peut utiliser la méthode variationnelle de Ritz [52]. C'est ce que fit Hylleraas. En utilisant des fonctions d'essai formellement dépendantes, entre autre, de la distance inter-électronique r_{12} , il prennait explicitement en compte les corrélations, notion sur laquelle nous reviendrons à plusieurs reprises dans la suite de la thèse. Le problème de la méthode d'Hylleraas est que les fonctions d'essai deviennent de plus en plus compliquées au fur et à mesure qu'augmente le nombre d'électrons, rendant ainsi son utilisation très difficile. Il fallait donc développer d'autres méthodes tout en simplifiant les hypothèses de départ.

Un atome est un système physique avec un centre de force bien défini dont la conséquence est une localisation des électrons autour du noyau qui

ressentent alors un champ pratiquement à symétrie sphérique. Cette constatation est le point de départ de tous les calculs atomiques dans les atomes à plusieurs électrons et est connue sous le nom d'approximation du champ central. Celle-ci est basée sur le modèle à particules indépendantes dans lequel chaque électron se déplace dans un potentiel central effectif représentant son interaction avec le noyau et l'effet moyen de la répulsion avec les autres électrons. Deux approches furent utilisées pour trouver ce potentiel central. La plus simple est le modèle de Thomas-Fermi basé sur des considérations statistiques et semi-classiques. La plus élaborée est celle d'Hartree-Fock. Cette dernière est issue du modèle à particules indépendantes et fut formulée par Hartree en 1928. Dans ce modèle, chacun des électrons a sa propre fonction d'onde. Hartree proposa également une méthode itérative de résolution basée sur le concept d'auto-consistance. Malheureusement, la fonction d'onde totale n'était pas antisymétrique. En 1930, sa méthode fut donc généralisée par Slater et Fock afin de tenir compte du principe d'exclusion de Pauli. Cette généralisation est désormais connue sous le nom de méthode Hartree-Fock. Elle est basée sur un principe variationnel dans lequel les fonctions d'essai sont des déterminants de Slater construits à partir d'orbitales mono-électroniques hydrogénoïdes. Dans une telle approximation, l'hamiltonien pour un atome ou un ion à N électrons s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2} - \sum_{i=1}^{N} \frac{Z}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_i|}, \tag{1.39}$$

où l'hypothèse d'un noyau infiniment lourd a été employée.

La méthode Hartree-Fock [53] donne la meilleure fonction d'onde possible compatible avec l'approximation à particules indépendantes. Mais afin de tenir compte des corrélations, on doit dépasser ce stade et utiliser des fonctions d'essai plus générales qu'un unique déterminant de Slater. Une généralisation possible est de prendre une fonction d'onde qui est la somme de déterminants de Slater de manière à ce que cette fonction soit état propre de L^2, S^2, L_z et S_z. Une telle fonction est appelée fonction d'état de configuration CSF.
Une amélioration supplémentaire consiste à former une combinaison linéaire de CSF. Dans ce cas, le processus auto-cohérent se déroulera en deux étapes et portera le nom de Méthode Hartree-Fock Multiconfigurée (MCHF). On peut citer le programme de C. Froese-Fischer ([54] et [55]) qui utilise cette méthode.

Théorie des perturbations à plusieurs corps : MBPT

La théorie des perturbations a été utilisée dès les années 1920 et ses formulations les plus connues sont celles de Rayleigh-Schrödinger et Brillouin-

Wigner. En principe, ces développement peuvent être utilisés à tous les ordres mais ils deviennent très lourds à partir du quatrième ordre. De nouvelles formulations puisant leurs origines dans la théorie quantique des champs furent développées à la fin des années quarante et au cours des années cinquante par Feynman ([15] et [56]) et Dyson ([57] et [58]), entre autres .

Les techniques appelées de nos jours théorie des perturbations à plusieurs corps (MBPT) font référence à celles utilisées pour la première fois en physique nucléaire pour l'étude du noyau, ce dernier constituant un système extrêmement compliqué dépourvu d'un centre de force bien déterminé au contraire de la physique atomique. Mais il fut montré qu'un tel système pouvait toutefois être décrit par un modèle à particules indépendantes. Ainsi, à la fin des années quarante, Goeppert Mayer [59] proposa un modèle en couche du noyau. Le problème supplémentaire de la physique nucléaire est la forte force répulsive existant entre les nucléons à petites distances, ce qui empêche l'utilisation de la théorie des perturbations sous sa forme usuelle. Brueckner et Levison [60] introduisirent un opérateur de réaction. De cette manière, une force inter-nucléaire effective fut obtenue. Celle-ci contenait la partie diagonale (approximation en échelle : ladder) de la véritable interaction.
Brueckner appliqua ce formalisme à des noyaux comprenant un grand nombre de nucléons et trouva que le développement perturbatif de l'énergie incluait des termes quadratiques par rapport au nombre de nucléons. Lorsque ce nombre augmentait, il conduisait à l'apparition d'une densité d'énergie augmentant sans cesse. Ces termes non physiques devaient donc être compensés par d'autres termes du développement. Il les appela réductibles puisqu'ils pouvaient être exprimés à l'aide de termes d'ordre inférieur. Le fait que ces termes pouvaient disparaître fut prouvé de manière rigoureuse par Goldstone [61] en utilisant des méthodes issues de la théorie quantique des champs. Celui-ci montra que les termes réductibles de Brueckner étaient représentés par des diagrammes déconnectés, c'est-à-dire contenant plusieurs parties non-connectées aux lignes extérieures [5].

Nous allons maintenant aborder les applications de ces techniques à la physique atomique.
La première application de la théorie des perturbations à plusieurs corps à la physique atomique fut faite par H. Kelly ([62], [63], [64] et [65]) au début des années soixante. Il appliqua le formalisme de Golstone dont le point de départ est l'équation de Schrödinger à plusieurs électrons où l'hamiltonien est (1.35). Cet hamiltonien est séparé de la façon usuelle, soit : $H = H_0 + V$

[5] La situation est identique à celle de la théorie quantique des champs où de tels diagrammes ne contribuent qu'à la phase de la fonction d'onde.

avec :

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} h_0(i) \text{ où } h_0 = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 - \frac{Z}{r} + u(r) \tag{1.40}$$

$$\text{et} \qquad V = \sum_{i<j=1}^{N} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^{N} u(r_i) \tag{1.41}$$

où u est un potentiel moyen.
Goldstone utilise ensuite la théorie des perturbations dépendante du temps et obtient :

$$E - E_0 = \triangle E = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \Psi_0 | V \left(\frac{1}{E_0 - H_0} V \right)^n | \Psi_0 \rangle_c \ , \tag{1.42}$$

où E est l'énergie totale, E_0 l'énergie non-perturbée, Ψ_0 la fonction d'onde de l'hamiltonien non-perturbé H_0 et l'indice c rappelle que seuls les diagrammes connectés sont pris en compte.

1.3.2 Cas relativiste

Il est maintenant bien reconnu que des calculs précis de structures atomiques, en particulier dans les atomes lourds, doivent tenir compte des effets relativistes. La première tentative ayant véritablement aboutie date de 1951 avec l'écriture d'une équation d'onde relativiste à deux corps par Bethe et Salpeter [66]. Celle-ci généralise au cas de deux corps l'équation de Dirac. Son extension à plus de deux corps n'est pas très difficile. Cependant, une telle équation souffre de deux problèmes :

- Premièrement, elle fait intervenir un noyau intégrable ne pouvant pas être écrit sous une forme fermée. L'origine de ce problème est que toute théorie quantique relativiste conserve uniquement la charge totale mais pas le nombre de particules ;

- Deuxièmement, elle fait intervenir plusieurs temps ce qui rend impossible sa réduction à une forme hamiltonienne. Ce second problème provient de la nécessité d'obtenir une théorie complètement covariante.

Il fallait donc prendre une autre voie. Les physiciens profitèrent alors du travail réalisé en mécanique quantique classique pour le problème à N-corps qui avait déjà soulevé de nombreuses questions. Il existe désormais plusieurs méthodes générales pour calculer les effets relativistes, les effets de corrélation et les effets de la BSQED dans les atomes à plusieurs électrons. Nous allons en présenter deux, la première étant une extension de l'approche variationnelle au cas relativiste et la seconde constituant une extension au cas relativiste

de la théorie des perturbations à plusieurs corps appelée RMBPT.

Méthodes variationnelles à tous les ordres

Les méthodes variationnelles sont des méthodes à tous les ordres [6] dans lesquelles la fonction d'onde totale de l'atome est représentée par une fonction d'essai construite de manière à couvrir la plupart de l'espace fonctionnel de l'hamiltonien. Suivant la forme de la fonction d'essai, on peut classer ces méthodes en trois groupes :

- *Premier Groupe* : La fonction d'essai est construite à partir de combinaisons linéaires de déterminants de Slater dépendant uniquement des coordonnées électroniques $|\mathbf{r}_i|$ et non des coordonnées relatives $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Les paramètres variationnels sont dans ce cas uniquement les fonctions d'onde mono-électroniques. La méthode est appelée Méthode de Dirac-Fock (DF) ;
- *Deuxième Groupe* : Les seuls paramètres variationnels sont les coefficients de mélange. La méthode est appelée RCI (Relativistic Configuration Interaction) ;
- *Troisième Groupe* : Les paramètres variationnels sont les fonctions d'ondes mono-électroniques et les coefficients de mélange. Cette méthode est appelée MCDF (Multiconfiguration Dirac-Fock).

L'extension de la méthode Hartree-Fock au domaine relativiste débute dès 1935 avec les travaux de Swirles ([67],[68]). Elle montra que l'équation de Dirac, tout comme l'équation de Schrödinger, pouvait être obtenue à partir d'un principe variationnel. La méthode portera désormais le nom de Dirac-Fock. L'équivalent relativiste de (1.38) est l'hamiltonien de Dirac-Coulomb :

$$H_{DC} = \sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \sum_{i>j}^{N} V_C(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \tag{1.43}$$

avec :

$$h_D = c\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta c^2 - \frac{Z}{r} \tag{1.44}$$

$$V_C(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{1.45}$$

Mais en 1951, un article de Brown et Ravenhall [69] annonça que l'hamiltonien (2.33) n'avait pas d'états propres correspondant à des états liés. Et cela,

[6] Les méthodes à tous les ordres sont des méthodes dans lesquelles sont resommées certaines sous-classes de diagrammes de Feynman. Mais il est impossible de sommer toutes les classes à tous les ordres [36].

en raison de l'existence du continuum d'énergies négatives. Ainsi, seule l'utilisation de la BSQED permettrait d'éviter cette catastrophe. Mais comme nous l'avons déjà signalé, faire des calculs avec cette méthode dans les atomes ou ions à plusieurs électrons est une chose impossible.

Pendant longtemps l'opérateur de Breit, qui était utilisé pour rendre compte de l'interaction électron-électron due à l'échange de photons transverses, fut jugé responsable de ce problème. L'origine de l'opérateur de Breit remonte à 1929 [70]. Ce dernier avait obtenu une expression rendant compte de manière correcte de l'interaction électron-électron [71] (comme du retard, par exemple) et dont la forme est (en jauge de Coulomb) :

$$\begin{aligned} B(i,j) = & -\frac{\alpha_i.\alpha_j}{r_{ij}} - \frac{\alpha_i.\alpha_j}{r_{ij}}(\cos(\omega_{ij}r_{ij}) - 1) \\ & +(\alpha_i.\nabla_i)(\alpha_j.\nabla_j)\frac{\cos(\omega_{ij}r_{ij}) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}} \ , \end{aligned} \tag{1.46}$$

où les opérateurs ∇_i et ∇_j n'agissent que sur les r_{ij} et non sur les fonctions d'onde ! Nous reviendrons dans le second chapitre sur la cause de la dépendance de jauge du potentiel de Breit. Il fallait donc trouver un hamiltonien tenant correctement compte de l'existence du continuum négatif. Cet hamiltonien sera obtenu à partir de la BSQED par Mittleman [72] et Sucher [73], entre autres. En écrivant de manière formelle l'hamiltonien d'un système à N-électrons sous la forme :

$$H = H_0[Ne^-, 0e^+] + H_1[(N+1)e^-, 1e^+] + H_2[(N+2)e^-, 2e^+] + \cdots \tag{1.47}$$

et en gardant seulement le premier terme de ce développement, nous arrivons à ce que l'on nomme l'approximation sans-paire (no-pair hamiltonian). Celui-ci exclut de manière explicite les paires électron-positron et cela nous amène à la notion de projecteur sur les états électroniques d'énergie positive, sur lesquels nous reviendrons au cours du deuxième chapitre.

La méthode MCDF permet de rendre compte des corrélations les plus importantes entre les électrons de valence des couches ouvertes. En revanche, la corrélation entre les électrons de valence et ceux du cœur sont difficiles à traiter dans cette approche.
Je terminerai en citant deux programmes reposant sur la méthode MCDF, celui de Desclaux [74] et celui de Grant [75]. Nous reviendrons plus en détail sur le fonctionnement du programme de J.P. Desclaux dans le troisième chapitre, puisque c'est le programme utilisé par notre équipe.

Théorie des perturbations à plusieurs corps relativistes : RMBPT

Depuis les travaux de Kelly, la théorie des perturbations à plusieurs corps est devenue l'une des méthodes les plus importantes et les plus utilisées pour calculer les niveaux d'énergie et les propriétés des systèmes atomiques. Le point de départ est encore l'hamiltonien sans-paire, c'est-à-dire que l'on se limite aux états propres d'énergie positive à l'aide d'opérateurs de projection, soit :

$$H = \Lambda^{++} \left[\sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \sum_{i<j=1}^{N} \frac{1}{r_{ij}} \right] \Lambda^{++} \tag{1.48}$$

On peut inclure l'interaction de Breit $B(i,j)$ afin de tenir compte des ordres les plus bas des interactions magnétiques et du retard (conséquence de la vitesse finie de la lumière), soit :

$$H^{\text{no-pair}} = \Lambda^{++} \left[\sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \sum_{i<j=1}^{N} \left(\frac{1}{r_{ij}} + B_{ij} \right) \right] \Lambda^{++} \tag{1.49}$$

Cet hamiltonien tient donc compte de l'interaction Coulombienne et de l'interaction de Breit entre les électrons, mais il ne prend pas en compte les effets dus aux paires ainsi que ceux de la BSQED, comme la S.-E. et la V.P.. Cependant, il peut être traité d'une façon semblable à celle de l'hamiltonien non-relativiste dans le cadre d'un développement en diagrammes connectés comme ([76], [77], [78] et [79]). La méthode RMBPT apparaît alors comme une généralisation directe de la méthode non-relativiste MBPT, elle-même basée sur la technique des diagrammes de Goldstone.

C'est une théorie similaire à celle de la BSQED à la différence que l'état de référence n'est plus le vide mais un état atomique. La principale difficulté liée à cette méthode provient des sommes infinies sur les états intermédiaires apparaissant lors des calculs. Les développements de la théorie basés sur l'utilisation de base ont permis de réaliser de grands progrès. L'astuce étant d'enfermer l'atome dans une boîte sphérique, ce qui permet d'obtenir un ensemble de solutions fini et complet de l'équation de Dirac à un électron. Cela permet alors de ramener les sommes infinies sur les états intermédiaires à des sommations discrètes et finies.

L'un des avantages de la méthode RMBPT provient du fait qu'elle permet d'obtenir d'une manière simple et automatique les corrélations à l'intérieur d'un atome à couches fermées ou entre un unique électron de valence et un cœur ionique à couches fermées. En revanche, elle est mise en difficulté lorsqu'on l'applique aux atomes ayant une structure en couche complexe.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons fait une étude exhaustive des différentes principales étapes ayant conduit aux techniques actuelles utilisées en physique atomique.

Nous avons vu que l'approximation sans paire est à la base des deux approches (MCDF et RMBPT) complémentaires du problème relativiste à plusieurs corps. Cependant, dans cette approximation, les effets des paires virtuelles ainsi que les corrections radiatives sont omis. Toutefois, avec la précision des expériences actuelles, il est nécessaire d'aller au-delà de cette approximation et les ions lourds constituent un excellent moyen pour tester les méthodes théoriques utilisées et en particulier les approximations réalisées.

Chapitre 2

Problèmes théoriques de l'étude relativiste des atomes à plusieurs électrons

2.1 Introduction

L'étude des ions lourds multichargés apporte des renseignements sur la physique des états liés à N-corps, mais également sur la QED en champs forts. La force responsable de la localisation des électrons près du noyau ainsi que de leur interaction mutuelle est la force électromagnétique. On dispose d'une théorie quantique de cette interaction avec la QED qui est à l'heure actuelle, comme je l'ai déjà signalé dans le premier chapitre, la théorie quantique des champs la plus précise dont on dispose. Mais cette théorie concerne en premier lieu des particules libres en interaction et son extension aux particules liées (Bound States QED : BSQED) fut nécessaire pour une utilisation en physique atomique.

Dans le cadre de la BSQED, les champs électroniques et photoniques sont quantifiés dans le champ électromagnétique nucléaire qui apparaît en première approximation comme un champ de fond classique. Les deux corrections radiatives les plus importantes sont l'énergie propre (Self-Energy : S.-E.) et la polarisation du vide (Vacuum Polarisation : V.P.) à l'ordre α. A la différence de la QED où les particules sont libres, il faut en BSQED évaluer ces corrections à tous les ordres en $Z\alpha$ représentant l'interaction coulombienne avec le noyau.

Par contre, si on désire aller aux ordres supérieurs, une prise en compte sérieuse des effets nucléaires doit être envisagée. Le noyau atomique n'est alors plus considéré comme une source ponctuelle classique. C'est à ce ni-

veau que l'évaluation des corrections radiatives se trouve limitée : d'une part, par l'influence des effets nucléaires dépendante du modéle nucléaire choisi et, d'autre part, par l'incertitude concernant les paramètres nucléaires comme la taille des nucléons par exemple.

On est donc confronté à deux difficultés majeures avec l'étude des ions lourds :

1) La superposition des effets de la BSQED et des effets à N-corps, se traduisant par ce que l'on nomme les corrélations sur lesquelles je reviendrai par la suite.

2) L'augmentation du couplage $(Z\alpha)$ avec la croissance de Z, ce qui rend difficile l'application des méthodes usuelles de la BSQED, elles-mêmes basées sur un développement perturbatif avec, par exemple, le cas de l'uranium hydrogénoïde $Z\alpha \sim 0.67$.

Pour résoudre la première difficulté, il a fallu mettre au point des techniques permettant de tenir compte de manière précise des effets à N-corps de sorte que les effets de la BSQED ne soient pas masqués. Les physiciens disposaient dans le cadre de la mécanique quantique non-relativiste d'une méthode pour le problème à N-corps qui donnait de bons résultats : la méthode Hartree-Fock. C'est une méthode de champ moyen dans laquelle chaque électron se déplace dans un champ central résultant de son interaction avec le noyau et les autres électrons. Ils généralisèrent cette méthode au domaine relativiste et obtinrent une précision suffisante de sorte que les effets de la BSQED peuvent être traités de manière perturbative.

Je commencerai dans ce chapitre par rappeler les solutions de l'équation de Dirac dans un champ central, puisque ces solutions constituent les briques à partir desquelles seront construits les états atomiques. J'aborderai ensuite le cas à plusieurs électrons et en particulier le problème lié au choix d'un hamiltonien à N-corps en relativité.

2.2 Atomes à un électron relativiste

2.2.1 L'équation de Dirac hydrogénoïde

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, la recherche d'une équation d'onde relativiste du premier ordre par rapport au temps amena Dirac à

l'équation suivante pour un électron lié :

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta c^2 + V(r))\Psi, \tag{2.1}$$

où la fonction Ψ est désormais un bispineur à quatre composantes, $V(r)$ le potentiel nucléaire et les matrices α_i (i=1,2,3) et β les matrices de Dirac vérifiant les relations : (1.5), (1.6) et (1.7). La représentation (1.8), appelée représentation de Pauli-Dirac, permet de retrouver facilement la limite non-relativiste à savoir l'équation de Pauli [80], car dans celle-ci le bispineur Ψ se scinde en deux morceaux :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{2.2}$$

où ϕ et χ sont deux spineurs à deux composantes. Pour de plus amples renseignements sur les matrices de Dirac, on pourra consulter la référence [81]. L'interaction d'un électron de Dirac avec un champ électromagnétique extérieur, caractérisé par un quadripotentiel A^μ tel que :

$$A^\mu_{ext}(x) = \{V_{ext}, \vec{A}_{ext}\}, \tag{2.3}$$

est introduite par l'intermédiaire du couplage minimun qui assure la covariance de l'équation ainsi que l'invariance de jauge locale du champ. Le couplage minimal est réalisé par la substitution $p^\mu(x) \rightarrow p^\mu(x) - A^\mu_{ext}$ dans l'équation (2.1), soit :

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}.\left(\vec{p} + ie\vec{A}_{ext}(x)\right) - V_{ext}(x) + \beta c^2\right]\Psi \tag{2.4}$$

Si l'on néglige les effets de recul dus à la masse finie du noyau pour un électron dans le champ coulombien d'un noyau de charge $+Z$, le champ extérieur peut alors être considéré comme statique. Le quadripotentiel est donné par :

$$A^\mu = \{\frac{Z}{r}, \vec{0}\} \tag{2.5}$$

On obtient donc la fonction d'onde de l'électron en résolvant l'équation de Dirac hydrogénoïde dans le référentiel du noyau, soit :

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha}.\vec{p} - \frac{Z}{r} + \beta c^2)\Psi = h_D\Psi \tag{2.6}$$

On obtient le système suivant pour ϕ et χ :

$$\left(\varepsilon - c^2 - \frac{Z}{r}\right)\phi = c\vec{\sigma}.\vec{p}\chi \tag{2.7}$$

$$\left(\varepsilon + c^2 - \frac{Z}{r}\right)\chi = c\vec{\sigma}.\vec{p}\phi \tag{2.8}$$

Dans ce cas, l'hamiltonien h_D commute avec l'opérateur du moment cinétique total $\mathbf{j}^2$, avec l'une de ses composantes j_z et avec l'opérateur de parité $P = \beta\pi$, lui-même équivalent relativiste de l'opérateur de parité π. On peut donc trouver des états d'énergie, de moment cinétique et de parité bien définis.

Cherchons une autre constante du mouvement. On peut espèrer être en mesure de vérifier si le spin de l'électron est aligné ou non avec le moment cinétique total. Pour cela, on introduit l'opérateur K (opérateur de Dirac commutant avec l'hamiltonien de Dirac) et son expression est la suivante :

$$K = \beta\left(\vec{\sigma}.\vec{l} + I\right) \tag{2.9}$$

([82] et [83])
Ses valeurs propes sont :

$$\begin{aligned} \kappa = l \qquad & \text{quand} \qquad j = l - \frac{1}{2} \\ \kappa = -(l+1) \qquad & \text{quand} \qquad j = l + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Pour un électron dans un champ central, on peut donc construire des fonctions propres communes à h_D, K, $\mathbf{j}^2$ et j_z de valeurs propres E, $-\kappa$, $j(j+1)$ et m. Entre κ et j existe une relation importante :

$$\kappa = \pm(j + \frac{1}{2}), \tag{2.10}$$

donc κ est un entier non nul. De manière explicite, l'opérateur K a pour expression :

$$K = \begin{pmatrix} \vec{\sigma}.\vec{l} + 1 & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma}.\vec{l} - 1 \end{pmatrix} \tag{2.11}$$

Donc les équations :

$$K\Psi_{n\kappa m} = -\kappa\Psi_{n\kappa m} \quad \text{et} \quad \mathbf{j}^2\Psi = j(j+1)\Psi \tag{2.12}$$

conduisent à :

$$\left(\vec{\sigma}.\vec{l} + 1\right)\phi = -\kappa\phi$$

et :

$$\vec{j}^2\phi = \left(\vec{l} + \frac{\vec{\sigma}}{2}\right)^2\phi = j(j+1)\phi$$

ainsi que :

$$\left(\vec{\sigma}.\vec{l} + 1\right)\chi = \kappa\chi$$

et :

$$\vec{j}^2\chi = \left(\vec{l} + \frac{\vec{\sigma}}{2}\right)^2 \chi = j(j+1)\chi$$

A partir de ces équations, on obtient :

$$-\kappa = j(j+1) - l_\phi(l_\phi + \frac{1}{4}) \quad \text{et} \quad \kappa = j(j+1) - l_\chi(l_\chi + 1) + \frac{1}{4} \tag{2.13}$$

Pour un κ et un j donnés, nous pouvons déterminer l_ϕ et l_χ, soit :

TAB. 2.1 - *Relations entre κ, j, l_ϕ et l_χ*

κ	l_ϕ	l_χ
$\kappa = j+1$	$j+\frac{1}{2}$	$j-\frac{1}{2}$
$\kappa = -(j+\frac{1}{2})$	$j-\frac{1}{2}$	$j+\frac{1}{2}$

Nous voyons donc que l_ϕ et l_χ diffèrent d'une unité, ce qui implique que les fonctions ϕ et χ sont de parité opposée.
Dans le cas d'un champ central, nous écrivons :

$$\Psi_{njm} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} f_{nl_\phi}(r)\Omega_{jl_\phi m}(\theta,\phi) \\ ig_{nl_\chi}(r)\Omega_{jl_\chi m}(\theta,\phi) \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

Toute la partie angulaire est contenue dans ce que l'on nomme les spineurs harmoniques sphériques (voir l'Annexe C) :

$$\Omega_{jlm}(\theta,\phi) = \sum_\sigma Y_l^{m-\sigma}(\theta,\phi)\phi^\sigma \langle lm - \sigma\frac{1}{2}\sigma | l\frac{1}{2}jm\rangle, \tag{2.15}$$

les $\langle lm - \sigma\frac{1}{2}\sigma | l\frac{1}{2}jm\rangle$ étant des coefficients de Clebsh-Gordan. En exprimant les différents coefficients, on obtient :

$$j = l + \frac{1}{2} \qquad \Omega_{jlm} = \begin{bmatrix} \left(\frac{j+m}{2j}\right)^{1/2} Y_{j-1/2}^{m-1/2}(\theta,\phi) \\ \left(\frac{j-m}{2j}\right)^{1/2} Y_{j-1/2}^{m+1/2}(\theta,\phi) \end{bmatrix}$$

$$j = l - \frac{1}{2} \qquad \Omega_{jlm} = \begin{bmatrix} -\left(\frac{j+1-m}{2j+2}\right)^{1/2} Y_{j+1/2}^{m-1/2}(\theta,\phi) \\ \left(\frac{j+1+m}{2j+2}\right)^{1/2} Y_{j+1/2}^{m+1/2}(\theta,\phi) \end{bmatrix}$$

La parité des spineurs sphériques est imposée par les orbitales sphériques et vaut $(-1)^l$.
Précédemment, nous avons vu qu'à des valeurs de κ et j fixées correspondaient un l donné. On a donc une équivalence entre les deux ensembles de nombres quantiques :

$$\{E, j, l, m\} \leftrightarrow \{E, \kappa, m\} \tag{2.16}$$

Nous pouvons donc écrire la fonction d'onde d'un électron dans un champ central sous la forme :

$$\Psi_{n,\kappa,m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} f_{n,\kappa}(r)\Omega_{\kappa,m}(\theta,\phi) \\ ig_{n,\kappa}(r)\Omega_{-\kappa,m}(\theta,\phi) \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

En posant :

$$f_{n,\kappa}(r) = \frac{F_{n,\kappa}}{r} \quad \text{et} \quad g_{n,\kappa} = \frac{G_{n,\kappa}}{r} \tag{2.18}$$

nous obtenons les équations radiales [84] [1] :

$$c\left(\frac{dF_{n,\kappa}}{dr} + \frac{\kappa}{r}F_{n,\kappa}\right) = \left(\varepsilon + c^2 + \frac{Z}{r}\right) G_{n,\kappa}$$
$$c\left(\frac{dG_{n,\kappa}}{dr} - \frac{\kappa}{r}G_{n,\kappa}\right) = \left(\varepsilon - c^2 + \frac{Z}{r}\right) G_{n,\kappa}$$

Or l'énergie totale ε est telle que $\varepsilon = E_{n,\kappa} + c^2$, où $E_{n,\kappa}$ est l'énergie de l'électron dans le champ central, soit :

$$\frac{dF_{n,\kappa}}{dr} + \frac{\kappa}{r}F_{n,\kappa} = \left[2c + \left(E_{n,\kappa} - \frac{Z}{r}\right)\right] G_{n,\kappa} \tag{2.20}$$

$$\frac{dG_{n,\kappa}}{dr} - \frac{\kappa}{r}G_{n,\kappa} = \left[E_{n,\kappa} - \frac{Z}{r}\right] F_{n,\kappa} \tag{2.21}$$

Le nombre quantique n est relié au nombre de noeuds n_r de la fonction d'onde radiale $P_{n\kappa}(r)$, appelée grande composante. Ceci est rassurant puisqu'à la limite non-relativiste seule cette composante reste et, dans ce cas, une telle relation existe.

On peut donc classer les états propres de h_D de la manière suivante :

[1] Pour obtenir les équations radiales vérifiées par F et G, la relation suivante est utile :

$$(\vec{\sigma}.\vec{p})\left[\frac{P(r)}{r}\Omega_{\kappa,m}\right] = \frac{i}{r}\left[\frac{dP}{r} + \frac{\kappa P}{r}\right]\Omega_{-\kappa,m} \tag{2.19}$$

TAB. 2.2 - *Labels et nombres quantiques*

Labels	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
κ	-1	1	2	-2	-3
$j = \lvert\kappa\rvert - \frac{1}{2}$	1/2	1/2	3/2	3/2	5/2
$\ell = \left\lvert\kappa + \frac{1}{2}\right\rvert - \frac{1}{2}$	0	1	1	2	2

2.2.2 Les effets de l'Electrodynamique Quantique dans la structure atomique

Introduction

Les bases théoriques de la physique atomique relativiste sont contenues dans l'électrodynamique quantique des états liés (BSQED). Toutefois, sans approximation, le calcul des strutures atomiques ne peut pas aller bien loin. La théorie de Dirac prévoit que les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ possèdent la même énergie. Mais comme le mesurèrent Lamb et Retherford, ces deux niveaux présentent une levée de dégénéréscence correspondant à un écart de 1057 MHz, désormais appelé déplacement de Lamb (Lamb shift). Ce déplacement provient de l'interaction de l'électron avec les fluctuations incessantes du vide de la théorie. Les deux contributions les plus importantes à l'ordre α sont, d'une part, l'énergie propre et, d'autre part, la polarisation du vide. L'importance de ces deux termes augmente en Z^4 et peut même devenir du même ordre de grandeur que l'effet de l'interaction inter-électronique.

L'énergie propre (Self-Energy : S.-E.)

FIG. 2.1 – *Diagramme de Feynman pour l'énergie propre (S.-E.)*

Comme le montre la figure 2.1, cette correction correspond à l'émission puis à la réabsorption d'un photon virtuel par l'électron lié. En dehors des atomes exotiques, c'est la correction la plus importante dans les atomes usuels. Mais, sans les outils de la renormalisation, son calcul conduit à une quantité infinie. En effet, ce diagramme correspond à l'élément suivant de la matrice S :

$$\langle\Phi_b^0|\hat{S}^{(2)}|\Phi_a^0\rangle = \alpha \int d^4x_1 d^4x_2 \left(\bar{\Psi}_B(x_2)\gamma^{\mu_2} S(x_2,x_1)\gamma^{\mu_1}\Psi_A(x_1)\right) D_{\mu_1\mu_2}(x_2 - x_1) \tag{2.22}$$

Cet élément est divergent et doit être soumis au processus de renormalisation. L'énergie propre renormalisée est alors écrite sous la forme suivante :

$$\triangle E_{SE}^{\text{Renorm.}} = \triangle E_{SE} - \triangle M, \tag{2.23}$$

avec $\triangle M$ le contre-terme de masse, défini par :

$$\triangle M = \delta m \int d\vec{r} N \left[\bar{\Psi}_B(\vec{r})\Psi_A(\vec{r})\right]^{2}, \tag{2.24}$$

δm étant la masse électromagnétique infinie. La renormalisation peut être effectuée de différentes manières. L'une de ces méthodes, développée par P.J. Mohr ([85] et [86]), est basée sur le procédé de régularisation de Pauli-Villars [87] appliqué au propagateur photonique. La "masse du photon" Λ [3] est reliée à la masse électromagnétique de l'électron par la relation :

$$\delta m = \frac{\alpha}{\pi}\left(\frac{3}{4}\ln(\Lambda^2) + \frac{3}{8}\right) \tag{2.25}$$

Suivant un tel procédé, la correction d'énergie propre se trouve séparée en deux parties :

$$\triangle E_{SE}^{\text{Renorm.}} = \triangle E_L + \triangle E_H^{\text{Renorm.}} \tag{2.26}$$

Le premier terme correspond à la contribution des photons virtuels de basse énergie et le second à ceux de haute énergie.

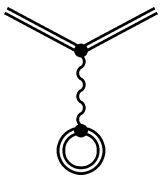


FIG. 2.2 – *Diagramme de Feynman représentant la polarisation du vide (V.P.)*

[2] Le symbole N indique que les opérateurs sont ordonnés normalement.

[3] Au vertex d'un diagramme de Feynman, c'est la quadri-impulsion qui est conservée. Alors la masse du photon virtuel qui vaut q_γ^2 n'est pas forcément nulle. La particule virtuelle est donc en dehors du niveau de masse.

La polarisation du vide (Vacuum Polarisation : V.P.)

Comme nous l'avons dit précédemment, l'autre correction d'ordre α est la polarisation du vide (Figure 2.2). L'élément de la matrice S correspondant à cette correction est :

$$\langle\Phi_b^0|\hat{S}^{(2)}|\Phi_a^0\rangle = -\alpha \int d^4x_1 d^4x_2 \left(\bar{\Psi}_A(x_1)\gamma^{\mu_1}\Psi_A(x_1)\right) Tr\left(S(x_2,x_1)\gamma^{\mu_2}\right) D_{\mu_1\mu_2}(x_2-x_1) \tag{2.27}$$

Le déplacement en énergie résultant de cet élément peut s'écrire :

$$\triangle E_{VP} = i \int dr_1 \left(\bar{\Psi}_A(\vec{r}_1)\gamma_0\phi(\vec{r}_1)\Psi_A(x_1)\right), \tag{2.28}$$

où le terme :

$$\phi(\vec{r}_1) = \int \frac{\rho_{VP}(\vec{r}_2)d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \tag{2.29}$$

ressemble à un potentiel de polarisation de la densité électronique. Ce déplacement $\triangle E_{VP}$ est divergent, ceci provenant de la singularité du propagateur électronique lorsque $\vec{r}_1 \to \vec{r}_2$.

Pour la renormalisation de cette quantité, on peut effectuer un développement en puissance de V, c'est-à-dire du nombre d'interaction de l'électron lié avec le champ du noyau atomique. Wichman et Kroll [48] ont montré que la polarisation du vide pouvait s'écrire sous la forme d'un potentiel effectif :

$$V^{VP} = \sum_{i=1,j=0}^{\infty} V_{i,2j+1}, \tag{2.30}$$

où $V_{i,2j+1}$ est un potentiel d'ordre $\alpha^i\,(Z\alpha)^j$. L'ordre en α^i représente le nombre de boucle qui écrante le noyau vis-à-vis de la particule liée et $(Z\alpha)^j$ est le nombre d'interaction avec le champ nucléaire. Dans le cas d'une seule boucle ($i=1$), le premier terme V_{11} correspond au potentiel d'Uëhling [46]. Les autres termes à une boucle non nuls sont ceux pour lesquels j est pair (Théorème de Furry [88]).

La correction d'ordre $\alpha^2\,(Z\alpha)$ est appelée correction de Källen-Sabry [89] et fut calculée exactement par T. Beier et G. Soff en 1987 [90] pour les ions heliumoïdes.

2.3 Atomes à plusieurs électrons

Dans la première section, nous avons étudié l'hamiltonien relativiste pour une particule de spin 1/2, c'est-à-dire l'hamiltonien de Dirac h_D, ainsi que les

corrections devant être incluses afin de rendre compte des résultats expérimentaux. Des tentatives ont été menées pour généraliser cette équation au cas de plusieurs particules. On a en effet cité dans le premier chapitre l'équation de Bethe-Salpeter qui s'applique au cas de deux particules et les problèmes qui lui sont associés.
Comme dans le cas non relativiste, l'hamiltonien d'un système à N-électrons peut être écrit :

$$H_{DC} = \sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \sum_{i>j}^{N} V_C(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{2.31}$$

Les opérateurs h_D sont les hamiltoniens de Dirac à 1 électron (2.1) et H_{DC} est appelé hamiltonien de Dirac-Coulomb. Il existe une différence essentielle entre les approximations réalisées dans les calculs classiques et celles dans les calculs relativistes en physique atomique. Alors que dans le premier cas des approximations sont introduites afin de simplifier la résolution numérique des équations, dans le deuxième cas des approximations doivent être déjà faites dans la définition de l'interaction effective entre les électrons [91] .

2.4 La recherche d'un hamiltonien pour le problème à plusieurs corps relativistes

2.4.1 Le problème du continuum négatif et l'hamiltonien sans-paire

Une des conséquences les plus extraordinaires de la relativité restreinte est la possibilité de création de particule due à l'équivalence entre la masse et l'énergie. Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, toute tentative d'établir une équation de Schrödinger relativiste conduit automatiquement à un continuum d'énergie négative. Grâce à une utilisation judicieuse du principe d'exclusion, Dirac réussit à surmonter cette difficulté (mer de Dirac).

Si l'on effectue une généralisation directe de l'hamiltonien de Schrödinger à plusieurs corps au cas relativiste en remplaçant $h_{NR}(i)$ par $h_D(i) = \vec{\alpha}_i.\vec{p}_i + \beta_i m + V_{ext}(i)$, on obtient alors l'hamiltonien de Dirac-Coulomb :

$$H_{DC} = \sum_{i=1}^{N} h_D(i) + V_{ee}, \tag{2.32}$$

qui conduit à l'équation familière :

$$H_{DC}\Psi(1,2,\cdots N) = E\Psi(1,2,\cdots N) \tag{2.33}$$

Toutefois, l'équation (2.33) n'a pas d'états propres normalisables [4] (Maladie de Brown-Ravenhall).

2.4.2 Conséquences

Bien que le défaut de H_{DC} fut signalé dans plusieurs articles ([93], [94] et [95]), il y eut peu de réaction. Les principales raisons de cet état de fait sont les suivantes :

1) H_{DC} fut utilisé par Breit dans son travail précurseur sur les effets dûs à l'échange de photons transverses entre les électrons ;

2) H_{DC} fut utilisé pour obtenir des équivalents relativistes aux équations d'Hartree-Fock ;

En revanche, si nous essayons de dépasser l'approximation d'une fonction d'état atomique se réduisant à un simple produit antisymétrisé de fonctions d'onde mono-électroniques (déterminant de Slater), les difficultés liées à l'usage de (2.33) apparaissent rapidement. En effet, dans le cas de l'utilisation de la méthode Dirac-Hartree-Fock (DHF), les équations sont obtenues à partir d'un principe variationnel :

$$\frac{\delta}{\delta\tilde{\Psi}}\langle\tilde{\Psi}|H_{DC}|\tilde{\Psi}\rangle = 0, \tag{2.34}$$

où :

$$\tilde{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{vmatrix} \psi_1(1) & \cdots & \psi_1(N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \tag{2.35}$$

avec la contrainte $\langle\tilde{\Psi}_i|\tilde{\Psi}_j\rangle = \delta_{ij}$. Cependant, puisque H_{DC} n'a pas d'états liés, la signification des $\tilde{\Psi}$ n'est pas claire. En particulier, $\tilde{\Psi}$ n'est pas une approximation d'une solution liée de (2.33) puisqu'une telle solution n'existe pas.

Néanmoins, de nombreux calculs menés de cette manière dans les ions lourds ont donné de bons résultats. C'est peut-être pour cette raison que la dissolution dans le continuum négatif continua à être ignorée. Mais une telle situation ne pouvait pas continuer indéfiniment. Alors, comme l'on va se servir des

[4] En effet, pour une paire d'électrons liés, il est possible de trouver un nombre infini de paires d'états (un dans le continuum positif et un autre dans le continuum négatif) ayant la même énergie [92]. On a donc couplage d'un état discret à un continuum.

$\tilde{\Psi}$ pour calculer des propriétés atomiques, on a donc besoin de comprendre leur signification physique et même si des calculs basés sur (2.34) donnent de bons résultats, il faut tout de même en comprendre les raisons.

Afin d'obtenir une réponse, on doit essayer de partir de la théorie fondamentale, c'est-à-dire de la BSQED.

2.4.3 La réponse de la BSQED

Comme nous allons le voir, la BSQED conduit d'une manière assez simple à des équations ne souffrant pas du problème de la dissolution dans le continuum d'énergies négatives. En particulier, elle conduit à l'hamiltonien :

$$\mathcal{H}^{\text{no-pair}} = \sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \Lambda_+ V_{ee} \Lambda_+, \tag{2.36}$$

avec :

$$\Lambda_+ = \Lambda_+(1)\Lambda_+(2)\cdots\Lambda_+(N) \tag{2.37}$$

Il s'agit d'un opérateur de projection qui empêche le couplage entre le continuum d'énergies positives et le continuum d'énergies négatives.

La principale caractéristique de la BSQED qui complique l'étude des états liés est que cette dernière autorise non seulement la création ou l'annihilation de photons virtuels (comme dans l'habituelle QED) mais également l'apparition de paires électron-positron virtuelles, grâce à la présence du troisième corps, c'est-à-dire le noyau atomique. Cela signifie que même en négligeant les photons, la description de l'état fondamental d'un atome à N-électrons de charge nucléaire Z nécessite non seulement la connaissance de la fonction d'onde à N variables $f_{Ne^-;0e^+}$, mais aussi des fonctions :

$$f_{(N+1)e^-;1e^+}, f_{(N+2)e^-;2e^+}, \cdots \tag{2.38}$$

Heureusement, à moins que la charge nucléaire Z ne soit très grande, nous pouvons traiter de la production et de l'annihilation de paires virtuelles par la théorie des perturbations. Nous allons voir comment la division de l'hamiltonien de la BSQED suivante :

$$H_{\text{BSQED}} = H_{\text{BSQED}}^{\text{no-pair}} + H_{\text{BSQED}}^{\text{pair}} \tag{2.39}$$

conduit à (2.36).

2.4.4 Obtention de l'hamiltonien sans-paire à partir de la BSQED

Voyons maintenant comment (2.36) émerge de la BSQED. Dans la jauge de Coulomb (de rayonnement), l'hamiltonien total de la BSQED est donné par (en dehors des contre-termes) :

$$H_{\mathrm{BSQED}} = H_{\mathrm{mat}} + H_{\mathrm{rad}} + H_{\mathrm{T}}, \tag{2.40}$$

où H_{mat} est l'hamiltonien des particules, H_{Rad} l'hamiltonien des champs transverses et H_{T} le terme d'interaction avec le champ transverse. L'hamiltonien des particules peut être séparé en deux parties, soit :

$$H_{mat} = H_{ext} + H_C \quad \text{avec} \quad H_C = \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(\vec{x})\rho(\vec{x'})}{|\vec{x}-\vec{x'}|} d^3\vec{x} d^3\vec{x'}, \tag{2.41}$$

où H_{ext} est l'hamiltonien des particules incluant le potentiel nucléaire et où H_C représente la répulsion Coulombienne entre les particules. Les termes H_{mat} et H_{Rad} ne dépendent que des seules variables dynamiques des particules ou que des seules variables dynamiques du champ transverse, mais pas des deux à la fois. Quant à la perturbation H_T, cette dernière contient à la fois des opérateurs de particules et des opérateurs de champ transverse :

$$H_T = -\int \vec{j}(\vec{x}).\vec{A}_T \quad \text{avec} \quad j^\mu(\vec{x}) = -eN[\bar{\psi}_D(\vec{x})\gamma^\mu\psi_D(\vec{x})] \tag{2.42}$$

Pour commencer, négligeons H_T et concentrons-nous sur H_{mat}. En utilisant la forme seconde quantifiée de ψ_D [5] pour déterminer ρ dans H_C, nous obtenons 16 termes qui peuvent être organisés de la manière suivante :

$$H_C = H_C^{\mathrm{no-pair}} + H_C^{\mathrm{pair}}, \tag{2.43}$$

$H_C^{\mathrm{no-pair}}$ étant la somme de quatre termes qui correspondent à des processus de diffusion purs ($e^- - e^-$ ou $e^+ - e^+$) et qui ne font pas intervenir la création ou l'annihilation de paires virtuelles.

Nous avons :

$$H_C^{\mathrm{no-pair}} = \frac{1}{2}\sum\left[M_C(n_1'n_2';n_1n_2)a^+_{n_1'}a_{n_1}a^+_{n_2'}a_{n_2}\right] + \cdots, \tag{2.44}$$

où :

$$M_C(n_1'n_2';n_1n_2) = \int\int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 u^+_{n_1'}(\vec{x}_1)u^+_{n_2'}(\vec{x}_2)\frac{e^2}{|\vec{x_1}-\vec{x_2}|}u_{n_1}(\vec{x}_1)u_{n_2}(\vec{x}_2) \tag{2.45}$$

[5] $\Psi_D(x) = \sum_{E_n>0} a_n u_n(x) + \sum_{E_m<0} b^+_m v_n(x)$

Puisque $H_C^{no-pair}$ commute avec $\hat{n}_{e^-}$ et $\hat{n}_{e^+}$, qui sont les opérateurs nombre d'occupation (c'est-à-dire les opérateurs comptant le nombre de quanta présents dans chacun des modes électroniques et positroniques), nous pouvons l'ajouter à H_{ext} et définir notre hamiltonien de matière d'ordre zéro par :

$$H_{mat}^0 = H_{ext} + H_C^{\text{no-pair}} \tag{2.46}$$

Puisque H_{mat}^0 commute avec $\hat{n}_{e^-}$ et $\hat{n}_{e^+}$, nous pouvons chercher des états propres de H_{mat}^0 tel que :

$$H_{mat}^0 \Psi = E\Psi \quad \text{avec} \quad \hat{n}_{e^-}\Psi = N\Psi \quad \text{et} \quad \hat{n}_{e^+}\Psi = 0 \tag{2.47}$$

La forme générale de Ψ est :

$$\Psi = \sum_{n_1 \cdots n_N} f(n_1 \cdots n_N) a_{n_1}^+ \cdots a_{n_N}^+ \left|0\right\rangle \text{ [6]} \tag{2.48}$$

Lorsqu'on cherche à revenir dans l'espace de configuration (jusqu'à présent, nous étions dans l'espace nombre d'occupation), les projecteurs :

$$\Lambda_+(i) = \sum_n u_n(i) u_n^+(i) \tag{2.49}$$

apparaissent puisque nous sommes dans la situation :

$$\hat{n}_{e^-}\Psi = N\Psi \quad \text{et} \quad \hat{n}_{e^+}\Psi = 0, \tag{2.50}$$

c'est-à-dire où aucun positron (électron d'énergie négative) n'est présent [7]. En raison de l'égalité :

$$\Lambda_+(i)\Psi = \Psi, \tag{2.51}$$

nous pouvons réécrire $H_{mat}^0 \Psi = \left(H_{ext} + H_C^{\text{no-pair}}\right)\Psi = E\Psi$ sous la forme :

$$H_{\text{mat}}^0 = \mathcal{H}^{\text{no-pair}} = \sum_{i=1}^{N} H_{D;ext}(i) + \sum_{i<j}^{N} \left[\Lambda_+(i)\Lambda_+(j)\frac{e^2}{r_{ij}}\Lambda_+(i)\Lambda_+(j)\right] \tag{2.52}$$

Nous obtenons donc une équation de type hamiltonien :

$$\mathcal{H}^{\text{no-pair}}\Psi_n = E_n \Psi_n \tag{2.53}$$

[6] Les $a_{n_1}^+ \cdots a_{n_N}^+ \left|0\right\rangle$ constituent les vecteurs de base de l'espace de Fock et les $f(n_1 \cdots n_N)$ sont les fonctions d'onde dans cet espace. $|f(n_1 \cdots n_N)|^2$ donne la probabilité de trouver une particule en chaque point $\vec{x}_1 \cdots \vec{x}_n$ [96].

[7] On a donc trouvé un moyen de traduire mathématiquement que tous les états d'énergie négative sont remplis (mer de Dirac).

Grâce à l'utilisation des projecteurs, nous pouvons inclure l'interaction de Breit dans l'hamiltonien $\mathcal{H}^{no-pair}$, soit :

$$H^0_{\text{mat}} = \mathcal{H}^{\text{nopair}} = \sum_{i=1}^{N} H_{D;ext}(i) + \sum_{i<j}^{N} \left[\Lambda_+(i)\Lambda_+(j) \left(\frac{e^2}{r_{ij}} + B_{ij} \right) \Lambda_+(i)\Lambda_+(j) \right] \tag{2.54}$$

Dans ce cadre, les effets des paires ne peuvent être pris en compte que par la théorie des perturbations.

2.4.5 Le choix des projecteurs

Il y a eu une polémique concernant l'utilisation des projecteurs dans les calculs de Dirac-Hartree-Fock. Heully et al. [97] ont montré que puisque les continuums d'énergie négative sont différents pour des potentiels différents, l'utilisation d'ondes planes, suggérée par Sucher [73], pouvait introduire quelques états d'énergie négative non-souhaités. Donc, au niveau de l'approximation sans-paire, la réponse est dépendante du choix effectué pour les opérateurs de projection. Cette dépendance disparaissant uniquement si des solutions exactes au problème sont utilisées. Mittleman [98] a montré qu'en partant d'un hamiltonien incluant des opérateurs de projection et qu'en cherchant ces derniers de façon à ce qu'ils rendent l'énergie stationnaire, on pouvait obtenir de façon exacte des opérateurs de projection associés au potentiel de Dirac-Hartree-Fock, et ceci dans le cas d'une fonction constituée par un unique déterminant.

Cette dernière approche fournissait une explication raisonnable au succès rencontré par la méthode Dirac-Hartree-Fock dans le calcul des énergies. Cependant, les résultats précédents avaient été encore obtenus dans le cadre de l'approximation à particules indépendantes, personne n'ayant proposé à cette époque une règle valable pour le cas multiconfiguré. Pourtant, plusieurs auteurs avaient remarqué les difficultés de convergence que rencontrait la méthode MCDF dans le cas de l'utilisation de plusieurs configurations. Au départ, ces problèmes furent attribués aux méthodes numériques utilisées. Mais par la suite, P. Indelicato et J.P. Desclaux [99] montrèrent que les problèmes de convergence étaient dus à l'influence du continuum négatif sur les orbitales de corrélation. Par voie de conséquence, les opérateurs de projection, qui ne sont pas indispensables dans les calculs Dirac-Fock à une configuration, sont nécessaires dans le cas des calculs MCDF.

P. Indelicato [100] fournira une méthode générale pour tenir compte des projecteurs dans n'importe quel calcul MCDF. Il montrera également que les erreurs faites dans les précédents calculs qui omettaient les projecteurs étaient négligeables dans les calculs faisant intervenir une seule configuration

ou dans les calculs MCDF avec des orbitales occupées. Ce qui confirmait le fait que les premiers calculs effectués avec la méthode DF sans utilisation des projecteurs donnaient de bons résultats.

Jusquà maintenant, nous nous sommes restreints à l'interaction Coulombienne entre les électrons. Cependant, n'importe quelle interaction électron-électron provoque le couplage avec le continuum négatif. Mais grâce aux opérateurs de projection, l'effet de cette dernière peut être évalué sans risque et ceci à n'importe quel ordre de la théorie des perturbations. La prochaine difficulté dans l'établissement d'un hamiltonien pour un système à N-électrons relativistes est la détermination de l'opérateur d'interaction électron-électron g_{ij}.

2.4.6 L'interaction électron-électron

Cette interaction doit être obtenue à partir de la BSQED et correspond à l'élément de la matrice S entre les états $|AB>$ et $|CD>$ (approximation à un photon) [8] :

$$S_{AB\to CD} = \alpha \int\int \bar{\Psi}_C(x_i)\bar{\Psi}_D(x_j)\gamma_i^\mu D_{\mu\nu}(x_i - x_j)\gamma_j^\nu \Psi_B(x_j)\Psi_A(x_i)d^4x_i d^4x_j \tag{2.55}$$

Il faut maintenant effectuer l'intégration temporelle pour obtenir l'opérateur recherché. Si l'on peut définir les énergies mono-électroniques ϵ_n, c'est-à-dire la dépendance temporelle des fonctions d'onde de chaque électron, alors l'intégration temporelle peut être réalisée et conduit aux résultats suivants selon le choix de jauge effectué pour $D_{\mu\nu}(x_1 - x_2)$ (le propagateur photonique) :

- en jauge de Lorentz :

$$\begin{aligned} S_{AB\to CD} = \quad & \delta(\omega_{AC}, \omega_{BD})\alpha \int\int \Psi_C^\dagger(x_i)\Psi_D^\dagger(x_j) \\ & \left[\frac{1-\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}}\cos(\omega_{ij}r_{ij})\right] \\ & \Psi_A(x_i)\Psi_B(x_j)d^3x_i d^3x_j \end{aligned} \tag{2.56}$$

- en jauge de Coulomb :

$$\begin{aligned} S_{AB\to CD} = \quad & \delta(\omega_{AC}, \omega_{BD})\alpha \int\int \Psi_C^\dagger(x_i)\Psi_D^\dagger(x_j) \\ & \left[\frac{1}{r_{ij}} - \frac{\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}}\cos(\omega_{ij}r_{ij}) + (\vec{\alpha_i}.\vec{\nabla}_i)(\vec{\alpha_j}.\vec{\nabla}_j)\left(\frac{\cos(\omega_{ij}r_{ij})-1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}}\right)\right] \\ & \Psi_A(x_i)\Psi_B(x_j)d^3x_i d^3x_j \end{aligned} \tag{2.57}$$

[8] Pour des raisons de clarté, on se restreint au terme direct. Mais toutes les conclusions de cette section s'appliquent également au terme d'échange.

où :

$$\omega_{ij} = \omega_{AC} = \alpha|\epsilon_A - \epsilon_C| = \omega_{BD} = \alpha|\epsilon_B - \epsilon_D| \tag{2.58}$$

est l'énergie du photon virtuel échangé [9] et $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est la distance inter-électronique.
A la limite non-relativiste $c \to \infty$ où $\omega_{ij} = 0$, les deux expressions sont égales et nous reconnaissons le terme de Coulomb classique en $\frac{1}{r_{ij}}$. On peut considérer les expressions précédentes comme les éléments de matrice des opérateurs effectifs :

$$\begin{aligned} g_{i,j} &= \frac{1-\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}} \cos(\omega_{ij} r_{ij}) \\ g_{i,j} &= \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}} \cos(\omega_{ij} r_{ij}) + (\vec{\alpha_i}.\vec{\nabla}_i)(\vec{\alpha_j}.\vec{\nabla}_j) \left(\frac{\cos(\omega_{ij} r_{ij}) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}} \right) \end{aligned} \tag{2.59}$$

La première expression correspond au choix de la jauge de Lorentz et la seconde au choix de la jauge de Coulomb. Le terme d'interaction électron-électron dépend donc de la jauge choisie. En ce qui concerne le déplacement en énergie, il est le même dans les deux jauges à condition que les fonctions d'onde mono-électroniques utilisées soient solutions d'équations différentielles locales. Par contre, lorsque des potentiels non-locaux sont utilisés comme dans les méthodes à tous les ordres (par ex. MCDF), la dépendance des éléments de matrice non-diagonaux vis-à-vis du choix de jauge est très forte ([75], [91], [101], [102] et [103]).
Il a été prouvé de façon théorique et confirmé par une confrontation avec les résultats expérimentaux ([104], [105] et [106]) que la jauge de Coulomb doit être utilisée. Cela provient du fait que les calculs auto-cohérents du type Dirac-Fock ainsi que n'importe quelle autre méthode basée sur un principe itératif utilisent l'approximation à un photon (d'ordre α) et ne prennent en compte qu'une partie des diagrammes de la BSQED d'ordre supérieur. Au deuxième ordre, par exemple, les diagrammes contenant des lignes photoniques croisées (crossed-ladder) et une partie des diagrammes non-croisés (ladder) sont omis. Il a été montré que ces effets sont plus importants en jauge de Feynman qu'en jauge de Coulomb où ils sont nuls [106], ce qui est à l'origine des différences obtenues dans les deux jauges.

[9] Le souvenir du caractère à deux temps de cette interaction se manifeste par la présence de ω_{ij}.

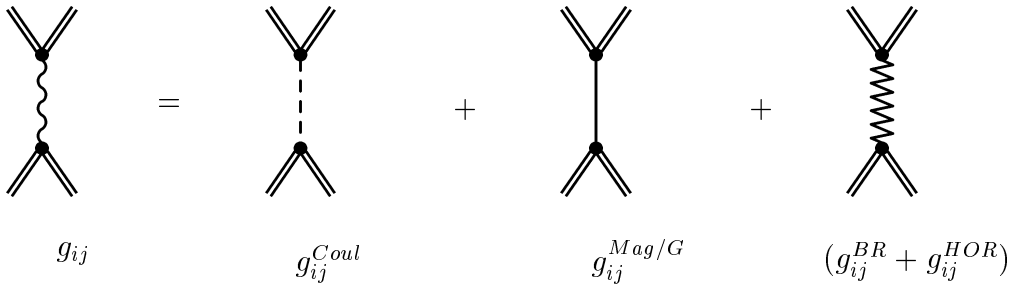


FIG. 2.3 – *Diagrammes de Feynman représentant les trois termes de l'interaction électron-électron g_{ij} en jauge de Coulomb*

L'interaction électron-électron g_{ij} (correspondant aux diagrammes de la figure 2.3) peut être écrite en jauge de Coulomb sous la forme :

$$g_{ij} = g_{ij}^{Coul} + g_{ij}^{Mag/G} + g_{ij}^{BR} + g_{ij}^{HOR}, \tag{2.60}$$

avec :

$$g_{ij}^{Coul} = \frac{1}{r_{ij}} \tag{2.61}$$

le terme Coulombien,

$$g_{ij}^{Mag/G} = -\frac{\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}} \tag{2.62}$$

le terme Magnétique ou de Gaunt,

$$g_{ij}^{BR} = -\frac{\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{2r_{ij}} - \frac{(\vec{\alpha}_i.\vec{r}_{ij})(\vec{\alpha}_j.\vec{r}_{ij})}{2r_{ij}} \tag{2.63}$$

le terme de retard de Breit (Breit Retardation), et

$$g_{ij}^{HOR} = -\frac{\vec{\alpha}_i.\vec{\alpha}_j}{r_{ij}}\left[\cos(\omega_{ij}r_{ij}) - 1\right] - (\vec{\alpha}_i.\vec{\nabla}_i)(\vec{\alpha}_j.\vec{\nabla}_j)\frac{\cos(\omega_{ij}r_{ij}) - 1}{\omega_{ij}^2 r_{ij}} - g_{ij}^{BR} \tag{2.64}$$

représente le retard d'ordre supérieur (High-Order Retardation).
Signalons pour terminer deux autres difficultés liées au choix de g_{ij} : premièrement, du fait qu'il dépende de ω_{ij}, l'opérateur $\mathcal{H}^{no-pair}$ n'est pas hermitien et, deuxièmement, dans le cadre du problème à N-corps relativistes, ω_{ij} est difficile à déterminer clairement.

2.4.7 Les différentes corrections à l'énergie des électrons liés dans un atome à plusieurs électrons

Introduction

Au début de ce chapitre, nous avons étudié l'équation de Dirac d'un système hydrogénoïde tout comme nous avons abordé les principales corrections à l'énergie (S.-E. et V.P.). Nous avons vu que ces corrections conduisent à des développements en $Z\alpha$, paramètre qui traduit l'ordre de grandeur des corrections radiatives.

Dans un atome à plusieurs électrons [10], il y a un paramètre supplémentaire : $1/Z$. Celui-ci caractérise l'ordre de grandeur de l'interaction entre les électrons (corrélation électronique).

Comportement des corrections vis-à-vis de Z

La contribution du déplacement de Lamb à un électron est d'ordre $Z(Z\alpha)^3$ à bas Z et devient comparable à l'énergie de corrélation électronique dès le milieu de la table périodique des éléments. Comme nous l'avons vu précédemment, l'approximation de l'hamiltonien sans-paire est à la base des calculs de physique atomique relativiste comme dans les méthodes MCDF et RMBPT. Dans cette approximation, les effets des paires virtuelles (électron-positron) sont négligés. Or, à haut Z, les contributions principales des paires virtuelles sont d'ordre $(Z\alpha)^3 \ln(Z\alpha)$ et $(Z\alpha)^3$ et deviennent comparables à l'énergie de corrélation. [11]

[10] On doit utiliser la charge effective du noyau Z_{eff} et non Z à cause de l'écrantage des autres électrons.

[11] Les autres effets contribuant à l'ordre $(Z\alpha)^3$ sont l'effet de retard, l'écrantage du Lamb shift ainsi que l'interaction de Breit du deuxième ordre (Breit-Breit).

Chapitre 3

La méthode Dirac-Fock multi-configurationelle (MCDF)

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons obtenu l'expression de l'hamiltonien effectif d'un atome. Nous devons donc résoudre l'équation :

$$\mathcal{H}^{\text{nopair}}\Psi(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) = \mathcal{E}\Psi(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) \tag{3.1}$$

Bien évidemment, comme nous l'avons déjà signalé à plusieurs reprises, une telle équation n'est pas directement soluble et nous devons avoir recours à des méthodes d'approximation. Ces dernières sont basées sur le modèle à particules indépendantes qui considère que chaque électron se déplace indépendamment des autres dans un champ moyen résultant du champ nucléaire et de la distribution de charge moyenne due aux autres électrons. Ce modèle peut être étendu aux particules relativistes dont la fonction d'onde est un bispineur de Dirac, c'est-à-dire :

$$\Psi(t, \vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(t, \vec{r}) \\ \psi_2(t, \vec{r}) \\ \psi_3(t, \vec{r}) \\ \psi_4(t, \vec{r}) \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

Nous pouvons en plus nous restreindre au cas de l'approximation du champ central. Par conséquent, comme dans le cas non-relativiste, nous pouvons considérer tout l'édifice atomique comme étant composé de couches et nous arrivons ainsi au modèle en couches de l'atome. Dans ce modèle, toutes les

fonctions d'onde d'une couche possèdent les mêmes parties radiales $P(r)$ et $Q(r)$ et les bispineurs s'écrivent :

$$\Psi_{n\kappa m} = \begin{pmatrix} -P_{n\kappa}(r)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+1/2-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \\ P_{n\kappa}(r)\sqrt{\frac{\kappa+1/2+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+1/2-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\sqrt{\frac{-\kappa+1/2+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

où $\mathrm{sgn}\kappa$ vaut $+1$ si $\kappa > 0$ et -1 si $\kappa < 0$. En revanche, elles ont un comportement différent vis-à-vis de l'orientation. En effet, comme nous l'avons vu au deuxième chapitre, les parties angulaires associées à P et à Q ont un nombre orbital l différent d'une unité. On associe l à P et $\bar{l}$ à Q [1]. Une sous-couche (nl) et une sous-couche $(n\bar{l})$ ont donc des parties radiales différentes. Ces deux sous-couches donnent la couche (nl) à la limite non-relativiste.

Plusieurs approches sont alors possibles pour résoudre (3.1), les deux principales étant basées d'une part sur la méthode des perturbations et d'autre part sur la méthode variationnelle.
L'avantage de la théorie perturbative est d'être systématique. Cette dernière fournit les corrections à l'énergie sous forme d'une série de puissance de la constante de couplage. En revanche, la méthode variationnelle présente une plus grande souplesse d'utilisation grâce au choix des fonctions d'essai utilisées. Nous allons rappeler comment la méthode Dirac-Fock multiconfigurée (MCDF) permet de résoudre cette équation. C'est effectivement cette dernière qui est mise en œuvre dans le programme utilisé par notre équipe. Il s'agit de l'analogue relativiste de la méthode MCHF. La nécessité d'utiliser des méthodes multiconfigurationnelles provient de l'importance de se rapprocher des résultats expérimentaux qui sont de plus en plus précis. Nous devons donc dépasser le modèle à particules indépendantes et tenir compte de la corrélation, c'est-à-dire qu'il faut aller plus loin que l'approximation de base qui consiste à prendre comme fonction d'onde approchée Φ un unique déterminant ou une combinaison de déterminants issus d'une même configuration. Cependant, avant d'aborder la méthode MCDF, nous allons rappeler les principes de la méthode Dirac-Fock (DF).

[1] Ces deux nombres vérifient que $l - \bar{l} = \mathrm{sgn}\kappa$

3.2 La méthode Dirac-Fock

Comme nous l'avons dit précédemment, il existe essentiellement deux méthodes de détermination approchée pour l'obtention des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde du spectre discret : la méthode des perturbations et la méthode variationnelle. Cette seconde méthode est très générale puisqu'elle est applicable chaque fois que l'équation à résoudre peut se mettre sous forme variationnelle.

3.2.1 Le Principe Variationnel

Bien que nous connaissions $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$, il en va autrement de ses états propres $|\Psi_n\rangle$ et de ses valeurs propres $\mathcal{E}_n$.
En prennant un ket $|\Phi\rangle$ quelconque de l'espace des états du système, la valeur moyenne de l'hamiltonien $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$ dans cet état est :

$$\left\langle \mathcal{H}^{\text{nopair}} \right\rangle = \frac{\left\langle \mathcal{H}^{\text{nopair}} \right\rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq \mathcal{E}_0, \tag{3.4}$$

où $\mathcal{E}_0$ est la plus petite des valeurs propres de $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$. Nous avons l'égalité si et seulement si $|\Phi\rangle$ est un vecteur propre de $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$ avec la valeur propre $\mathcal{E}_0$.

Cette propriété est le point de départ d'une détermination approchée de $\mathcal{E}_0$. On choisit de manière arbitraire[2] un ensemble de fonctions d'essai dépendant de paramètres. La valeur moyenne $\left\langle \mathcal{H}^{\text{nopair}} \right\rangle$ est alors rendue stationnaire par rapport à ces paramètres. La valeur obtenue est en général un minimun et peut servir d'approximation à l'énergie du niveau fondamental du système.

Théorème de Ritz

Ce théorème étend le principe précédent puisqu'il énonce que la valeur moyenne de l'hamiltonien $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$, qui est une fonctionnelle, est stationnaire au voisinage de ses valeurs propres discrètes. De ce théorème, on déduit que la valeur moyenne $\left\langle \mathcal{H}^{\text{nopair}} \right\rangle$ est stationnaire si et seulement si le vecteur d'état $|\Phi\rangle$auquel elle correspond est vecteur propre de $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$, les valeurs stationnaires de $\left\langle \mathcal{H}^{\text{nopair}} \right\rangle$ étant les valeurs propres de $\mathcal{H}^{\text{nopair}}$.

La valeur moyenne a été précédemment définie en utilisant des kets $|\Phi\rangle$ non normalisés. Dans de nombreuses situations, il convient de restreindre

[2] Ce choix est en général dicté par les symétries du système physique considéré.

les variations à l'espace des kets normés. Le principe variationnel, désormais appelé principe d'optimisation avec contraintes, est alors appliqué à la fonctionnelle :

$$F[\Phi] = \mathcal{E}[\Phi] + \lambda \langle \Phi | \Phi \rangle \tag{3.5}$$

Deux manières d'utiliser le principe variationnel pour obtenir des fonctions d'onde approchées

La première façon consiste à considérer une classe de fonctions Φ de forme analytique spécifique contenant des paramètres, dont les "meilleures" valeurs au sens variationnel sont déterminées en rendant F stationnaire par rapport à ces paramètres. On trouve dans cette catégorie la méthode d'Hyleraas consistant à introduire la distance inter-électronique r_{ij} dans la fonction d'onde.

Quant à la seconde, elle considère une classe de fonctions Φ construites d'une façon spécifique à partir de fonctions arbitraires des variables du problème. Ces fonctions sont alors déterminées de sorte à minimiser F : c'est la méthode Dirac-Fock (DF).

3.2.2 Les trois étapes des calculs de structures atomiques

Dans l'approximation à particules indépendantes, nous nous intéressons aux calculs de structures atomiques. Dans ce modèle, l'état atomique est représenté par une fonction d'onde Φ qui, pour une configuration à couches complètes, consiste en un unique déterminant de fonctions d'onde mono-électroniques : il s'agit dans notre cas des bispineurs de Dirac sphériques. Nous voulons trouver les parties radiales $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$ de ces fonctions ψ, de sorte que la quantité :

$$F = \langle \Phi | \mathcal{H}^{\text{no-pair}} | \Phi \rangle + \lambda \langle \Phi | \Phi \rangle \tag{3.6}$$

soit stationnaire par rapport aux variations des fonctions $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$.

La détermination des fonctions d'onde radiales se fait en trois étapes :

1) Détermination de l'expression de F par rapport aux fonctions d'onde mono-électroniques

2) Obtention à partir de l'expression de F des équations vérifiées par les fonctions d'onde radiales. Cette étape nécessite le calcul des intégrales angulaires

3) Résolution de ces équations

Les fonctions d'onde des systèmes à plusieurs électrons

La fonction d'onde d'un système à N-électrons relativistes a 4^N composantes et les matrices de Dirac correspondantes sont de type : $4^N \times 4^N$. Cependant, comme dans le cas non-relativiste, nous n'avons pas besoin de travailler avec la fonction d'onde complète, mais nous pouvons la décomposer sur les représentations irréductibles de $\mathbf{J}^2$ et l'écrire par rapport aux fonctions d'onde mono-électroniques (dans notre cas, les bispineurs de Dirac). La forme la plus simple pour la fonction d'onde d'un système à N-électrons obéissant au principe de Pauli est une fonction écrite sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_a(\mathbf{r}_N) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_b(\mathbf{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

Ce type de fonctions d'onde n'est exact qu'à la limite où les électrons n'interagissent pas (modèle à particules indépendantes). Cependant, elles se révèlent être une bonne approximation de la fonction d'onde des atomes à couches fermées où le champ moyen est à symétrie sphérique. Des combinaisons linéaires de tels déterminants peuvent être utilisées afin de donner une meilleure estimation de l'énergie moyenne.

Nous allons donc devoir calculer des éléments de matrice du type :

$$\left\langle \Phi \middle| \hat{f} \middle| \Phi \right\rangle = \frac{1}{N!} \int .. \int \begin{vmatrix} \psi_a^+(\mathbf{r}_1) & \psi_a^+(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_a^+(\mathbf{r}_N) \\ \psi_b^+(\mathbf{r}_1) & \psi_b^+(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_b^+(\mathbf{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_N^+(\mathbf{r}_1) & \psi_N^+(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N^+(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \hat{f} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_a(\mathbf{r}_N) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_b(\mathbf{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

avec :

$$\hat{f} = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}(r_i) \equiv \sum_i \hat{f}_i$$

Cette équation peut être simplifiée grâce à des argument dus à Löwdin [107]. Si l'on développe le premier déterminant, il y aura un terme constitué du produit direct des éléments de la diagonale principale. La contribution de ce terme à l'élément de matrice sera :

$$\left\langle \Phi \middle| \hat{f} \middle| \Phi \right\rangle = \frac{1}{N!} \int \int ... \int \psi_a^+(\mathbf{r}_1)\psi_b^+(\mathbf{r}_2)...\psi_N^+(\mathbf{r}_N)\hat{f} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_a(\mathbf{r}_N) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_b(\mathbf{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

On peut montrer que les $N!$ termes obtenus en développant le déterminant

donneront le même résultat. Nous obtenons donc :

$$\left\langle \Phi \left| \hat{f} \right| \Phi \right\rangle = \int\int ... \int \psi_a^+(\mathbf{r}_1)\psi_b^+(\mathbf{r}_2)...\psi_N^+(\mathbf{r}_N)\hat{f} \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_a(\mathbf{r}_N) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_b(\mathbf{r}_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

On peut trouver les détails du calcul précédent dans la référence [108].

3.2.3 Première étape : Détermination de F

Pour cela, nous allons devoir calculer les éléments de matrice du hamiltonien. Celui-ci peut être séparé en des parties à 1 électron et à 2 électrons.

Opérateurs à un électron

$$\left\langle \Phi \left| \sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i \right| \Phi \right\rangle = \sum_i \langle i| f |i\rangle$$

L'hypothèse ici faite est que les fonctions d'onde mono-électroniques constituent un ensemble complet orthonormé. Dans le cadre de la méthode Dirac-Fock, ces opérateurs sont issus de $H_{D;ext}(i)$, c'est-à-dire du hamiltonien de Dirac[3] de l'électron n°i en présence du potentiel nucléaire. Ils sont au nombre de trois :

1) L'énergie potentielle : V_N
2) L'énergie cinétique : $c\vec{\alpha}.\vec{p}$
3) L'énergie de repos : βc^2

Opérateurs à deux électrons

L'opérateur est maintenant de la forme $\hat{f}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ avec :

$$\sum_{i>j} \hat{f}_{ij} \equiv \sum_{i>j} \hat{f}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \tag{3.7}$$

En prenant la diagonale principale, notre élément de matrice aura la forme :

$$J = \int\int \psi_a^+(\mathbf{r}_1)\psi_b^+(\mathbf{r}_2)\hat{f}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

[3]Le fait d'utiliser l'hamiltonien de Dirac permet d'introduire les corrections dues à la variation de masse, au terme de Darwin et à l'interaction spin-orbite dans la description de la cinématique des électrons et de leur intéraction avec le potentiel nucléaire.

Il y a un terme supplémentaire qui contribue à la valeur moyenne. Il s'agit du terme dans lequel le changement :

$$\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \rightarrow \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)$$

a été fait. Ce terme conduit au terme dit d'échange :

$$K = -\int\int \psi_a^+(\mathbf{r}_1)\psi_b^+(\mathbf{r}_2)\hat{f}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

Dans le cas d'un atome à N électrons, ce que l'on utilise est la somme de ces termes pour toutes les paires d'électrons que l'on peut former, soit :

$$\left\langle \Phi \left| \sum_{i>j} \hat{f}_{ij} \right| \Phi \right\rangle = \sum_{i>j} \left[\left\langle ij \left| \hat{f} \right| ij \right\rangle - \left\langle ij \left| \hat{f} \right| ji \right\rangle \right]$$

Dans la méthode Dirac-Fock, l'opérateur à deux électrons qui nous intéresse est l'opérateur g_{ij} que nous avons présenté au chapitre précédent. Le lecteur désireux de connaître les détails de l'évaluation de ces différents opérateurs pourra consulter la référence [109].
Cependant, les fonctions d'onde précédentes (constituées d'un seul déterminant) ne sont pas, en dehors des systèmes à couches complètes, des états propres de l'opérateur moment cinétique total J^2 comme le sont les fonctions propres exactes. En formant des combinaisons linéaires de déterminants issus de la même configuration, c'est-à-dire des déterminants avec les mêmes n, j et κ mais avec des valeurs de m différentes, nous pouvons construire des fonctions propres de J^2. Ces combinaisons sont appelées Fonctions d'état de Configuration[4] (CSF) et sont notées : $|\gamma\Pi JM\rangle$. Les coefficients d_i sont obtenus en demandant que les CSF soient également états propres de $\mathbf{J}^2$. La méthode utilisée dans le programme MDFGME est très générale. En effet, tous les déterminants intervenant dans une CSF ayant les mêmes valeurs de la parité Π et de M, la matrice de J^2 est construite puis diagonalisée ce qui permet d'obtenir les coefficients recherchés. Il existe une autre façon de construire les CSF basée sur l'utilisation des coefficients de parenté fractionnaire suivie d'une antisymétrisation explicite. Des détails sur cette méthode peuvent être trouvés dans la référence [110]. Le programme MDFGME utilise la première méthode [111]. Pour un système à N-électrons, une fonction

[4]Les différents nombres quantiques magnétiques des orbitales servant à construire les déterminants appartenant à une même fonction d'état de configuration sont liés par $\sum_{j=1}^{N} m_j = M$.

d'état de configuration est donc :

$$|\gamma\Pi JM\rangle = \sum_{i=1} d_i \begin{vmatrix} \Psi_1^i(\vec{r}_1) & \cdots & \Psi_N^i(\vec{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_1^i(\vec{r}_N) & \cdots & \Psi_N^i(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \tag{3.8}$$

Tout comme dans le cas non-relativiste, il est utile d'introduire la notion d'énergie moyenne d'une configuration E_{AV} définie par :

$$E_{AV}(jj) = \frac{\sum(2J+1)E(J)}{\sum(2J+1)} \tag{3.9}$$

Les parties radiales sont obtenues en appliquant à celle-ci le principe variationnel. En effet, à partir d'une configuration ne contenant pas uniquement des couches complètes, nous pouvons obtenir plusieurs niveaux et en dehors de cas spéciaux comme la configuration *sp*, les fonctions radiales ne dépendent pas énormément du niveau considéré. Afin de déterminer l'expression de E_{AV}, nous devons calculer l'interaction d'un électron avec une couche fermée. Nous obtenons alors :

$$E_{AV} = \sum_A q_A \left[I(A,A) + \frac{(q_A-1)}{2} E_{int}(A,A) + \sum_{A\neq B} q_B E_{int}(A,B) \right] \tag{3.10}$$

où les q_A sont les nombres d'occupation des différents états. Les expressions des termes $E_{int}(A,A)$ et $E_{int}(A,B)$ dépendent des termes retenus dans l'expression de l'interaction électron-électron $g_{ij} = g_{ij}^C + g_{ij}^M + g_{ij}^R$. En effectuant l'intégration angulaire[5], nous nous retrouvons avec des intégrales radiales mettant uniquement en jeu les fonctions P_A, Q_A ainsi que des coefficients angulaires. La fonctionnelle énergie E_{AV} associée à une CSF peut donc être écrite comme une combinaison linéaire d'intégrales radiales à 1 électron, $I(A,A)$ et à 2 électrons $E_{int}(A,A)$ et $E_{int}(A,B)$. Les expressions de ces différentes intégrales dans le cas de la méthode DF peuvent être trouvées dans la référence [112].

3.2.4 Deuxième étape : Les équations de Dirac-Fock

Les équations vérifiées par les fonctions radiales P et Q s'écrivent en annulant les dérivées fonctionnelles de F par rapport à ces composantes,

[5]Pour la méthode Hartree-Fock, nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage de C. Froese-Fischer [55].

soit :

$$\frac{\partial F}{\partial P_{n\kappa}(r)} = \frac{\partial\Big[E_{AV} - \sum_{ij} \epsilon_{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle\Big]}{\partial P_{n\kappa}(r)} = 0 \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial F}{\partial Q_{n\kappa}(r)} = \frac{\partial\Big[E_{AV} - \sum_{ij} \epsilon_{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle\Big]}{\partial Q_{n\kappa}(r)} = 0 \tag{3.12}$$

Les fonctions d'onde radiales P et Q doivent alors vérifier un ensemble d'équations intégro-différentielles et ce autant qu'il y a de fonctions dans la base. Pour une orbitale A, après avoir effectué les intégrations angulaires, ces dernières s'écrivent :

$$\frac{dP_A}{dr} + \frac{\kappa_A}{r} P_A = \left[2c^2 + \frac{1}{c}(\epsilon_A - V)\right] Q_A + \sum_{B \neq A} \left(X_{AB} + \frac{\epsilon_{AB}}{c}\right) Q_B \tag{3.13}$$

$$\frac{dQ_A}{dr} - \frac{\kappa_A}{r} Q_A = -\frac{1}{c}\left[\epsilon_A - V\right] P_A - \sum_{B \neq A} \left(X'_{AB} + \frac{\epsilon_{AB}}{c}\right) P_B \tag{3.14}$$

où V est la somme du potentiel nucléaire et de l'interaction directe entre les électrons, où X_{AB} et X'_{AB} sont des potentiels d'échange et où les ϵ_A et les ϵ_{AB} sont des multiplicateurs de Lagrange introduits afin d'imposer l'orthonormalisation entre les fonctions d'onde mono-électroniques.

Afin d'obtenir des résultats plus précis, il est nécessaire de dépasser le modèle à particules indépendantes en tenant compte de la corrélation.

La corrélation

Cette dernière a deux origines. Premièrement, le caractère antisymétrique de la fonction d'onde atomique conduit à un *genre* de corrélation entre les positions des particules de spins parallèles même s'il n'y a aucune interaction entre ces particules. Deuxièmement, l'interaction pouvant exister entre des particules provoque également une corrélation entre leurs positions et ce même en l'absence de tout postulat de symétrisation.

Ces deux effets sont appelés corrélation statique (échange) et corrélation dynamique. Il faut noter que ces deux effets ne sont pas additifs et que cette séparation est purement conventionnelle. De nos jours, la séparation usuelle consiste à considérer que toute la corrélation statique (l'échange) est incluse dans l'approximation de Dirac-Fock et d'appeler corrélation la corrélation dynamique. Nous pouvons étendre la définition donnée par Löwdin de la corrélation au cas relativiste et définir :

$$E^{\text{corr}} = E^{\text{exact}} - E^{\text{DF}}, \tag{3.15}$$

avec E^{exact} la solution exacte de l'équation (3.1) Cette corrélation a plusieurs origines. Ce peut être, par exemple, la répulsion coulombienne entre les électrons ou la partie magnétique issue du terme de Breit.

3.2.5 De meilleures approximations

Deux types d'amélioration de l'approximation

L'approximation de base dans les calculs de structures atomiques est de prendre comme approximation d'une fonction d'onde Φ représentant une unique configuration un seul déterminant consitué de fonction d'onde ψ_α (ici des bispineurs de Dirac) dans le cas de couches complètes ou une combinaison linéaire de tels déterminants pour un système à couches ouvertes. Le déterminant est une expression formelle du modèle de l'atome dans lequel chaque électron est supposé être dans un état stationnaire dans le champ du noyau et des autres électrons, mais où l'indétermination porte sur l'électron dont l'état est représenté par la fonction d'onde ψ_α.

Il y eut plusieurs manières d'améliorer cette approximation. Une façon d'améliorer cette approximation est d'utiliser des fonctions Φ mettant explicitement en jeu les r_{ij} ou les θ_{ij} qui sont, d'une part, la distance entre deux électrons i et j et, d'autre part, leur orientation spatiale. Toutefois, l'utilisation de telles fonctions d'onde implique le rejet de l'idée de "configuration". C'est le type d'approche dit de Hylleraas.

Une autre approche pour améliorer la précision tout en conservant la notion de configuration consiste à représenter un état atomique non pas par une fonction représentant une unique configuration mais par la superposition d'un ensemble de fonctions, chacune issue d'une configuration différente.

Superposition de configurations

En construisant une fonction d'onde approchée qui superpose des fonctions représentant différentes configurations, nous devons inclure dans le cas relativiste celles ayant la même parité Π, le même J et le même M. Ces fonctions sont alors appelées Fonctions d'Etat Atomique (ASF) et ont pour expression :

$$|\Pi JM\rangle = \sum_{i=1}^{NCF} c_i \Phi(\gamma_i \Pi JM),$$

où NCF représente le nombre total de CSF incluses dans la définition de la fonction d'état atomique. On applique ensuite le principe variationnel à la

nouvelle fonctionnelle obtenue et soumise à la contrainte supplémentaire :

$$\sum_{i=1}^{NCF} c_i^2 = 1 \tag{3.16}$$

Il y a deux façons d'effectuer des calculs de structures atomiques basées sur l'utilisation de fonctions d'onde multiconfigurées :

a) La première consiste à superposer des configurations et à considérer les fonctions d'onde radiales comme étant données. Les coefficients de mélange c_i sont donc ajustés de façon à minimiser la fonctionnelle. Il s'agit alors de la méthode d'interaction de configurations relativistes (RCI).

b) La seconde considère les fonctions d'onde radiales de chaque configuration comme étant libres d'être modifiées par la superposition des autres configurations. Cela nous conduit au sujet de la prochaine section, la méthode MCDF.

3.3 La Méthode MCDF

3.3.1 La corrélation dans les atomes complexes

Bien que la méthode Dirac-Fock fournisse de bons résultats lors du calcul de nombreuses propriétés atomiques, une analyse précise des résultats obtenus montre un léger désaccord avec les valeurs expérimentales. Le problème provient du fait que dans la méthode Dirac-Fock nous ne tenons compte que de l'échange, mais nous négligeons complètement la corrélation (corrélation dynamique) existant entre les mouvements des différents électrons.

3.3.2 Les fonctions d'onde

La fonction d'onde totale dans la méthode Dirac-Fock Multi-Configurée (MCDF) est construite comme une superposition de CSF :

$$\Psi(\Pi JM) = \sum_{\nu=1}^{N_{CF}} c_\nu \left|\gamma_\nu \Pi JM\right\rangle \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^{M} c_\nu^2 = 1 \tag{3.17}$$

3.3.3 La Fonctionnelle Energie E'

Elle a désormais pour expression :

$$E'\left[\Psi(\Pi JM)\right] = \sum_{\nu=1}^{NCF}\sum_{\mu=1}^{NCF} c_\nu c_\mu \left\langle \Phi\left(\gamma_\nu \Pi JM\right) \left|\mathcal{H}^{\text{no-pair}}\right| \Phi\left(\gamma_\mu \Pi JM\right)\right\rangle \tag{3.18}$$

3.4 Les équations intégro-différentielles de la méthode MCDF

3.4.1 Les équations radiales

Comme la méthode DF, la méthode MCDF est basée sur un principe variationnel mais comporte maintenant une variation supplémentaire. En effet, nous pouvons, en plus de la variation par rapport aux deux fonctions radiales P et Q, effectuer une variation par rapport aux coefficients de mélange c_ν. Nous obtenons ainsi deux ensembles d'équations variationnelles :

a) Les coefficients de mélange c_ν sont les composantes de l'un des vecteur propre de la matrice hamiltonienne et dépendent de l'état étudié. Ils sont obtenus en annulant les dérivées partielles de la valeur moyenne $\mathcal{E}$ du hamiltonien sur la base des CSF, soit :

$$\frac{\partial \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\partial c_\nu} = 0 \tag{3.19}$$

Ces équations peuvent être écrites sous une forme matricielle. Si l'on définit un vecteur colonne constitué des coefficients de mélange c_ν, nous avons :

$$E' = \mathbf{c}^t.\mathbf{H}.\mathbf{c} \quad \text{avec} \quad \mathbf{c} = (c_1, c_2, \cdots, c_{N_{CF}})^t \tag{3.20}$$

Ces équations se résolvent en diagonalisant l'opérateur hamiltonien sur la base utilisée.

b) De même, la variation des fonctions d'onde radiales conduit aux équations intégro-différentielles (3.12) que nous avions obtenues lors de notre étude sur la méthode DF. Désormais, les potentiels V et les X sont des fonctions explicites des coefficients de mélange c_ν. Etant donné que l'équation de Dirac admet des solutions d'énergie négative, l'application du principe variationnel donne uniquement une solution stationnaire, et ce même pour l'état fondamental. Nous rappellons que dans le cas non-relativiste, il s'agit d'un minimun. Dans le cas relativiste, il est donc nécessaire de restreindre aux fonctions correspondant à des états d'énergie positive l'espace fonctionnel auquel le principe variationnel est appliqué afin d'obtenir un minimun. Cette restriction est assurée par les opérateurs de projection.

Nous ne rentrerons cependant pas dans les détails des méthodes numériques utilisées pour résoudre ces diverses équations. Le lecteur intéressé pourra consulter la référence [112]. Nous indiquons uniquement la stratégie employée pour effectuer un calcul avec la méthode MCDF.

1) Etant donné un ensemble de coefficients c_ν, on minimise l'énergie totale par rapport aux fonctions P et Q. Ceci constitue le problème auto-cohérent

usuel. Celui-ci est répété plusieurs fois jusqu'à l'obtention de la précision souhaitée. Nous obtenons alors un nouvel ensemble de parties radiales.

2) Avec les nouvelles fonctions d'onde radiales, nous diagonalisons la matrice énergie et un nouvel ensemble de coefficients c_ν est obtenu.

Ce processus en deux étapes est alors répété jusqu'à ce que l'énergie soit constante à la précision souhaitée entre deux cycles successifs.

3.5 Conclusion

Comme nous l'avons signalé dans la section précédente, la méthode MCDF permet de rendre compte de la corrélation existant entre les électrons d'un atome complexe. Mais cela se traduit par une augmentation importante de la complexité des calculs dont la conséquence est que le processus ne converge pas toujours. Toutefois, pour tenter de surmonter cette difficulté, le programme MDFGME offre plusieurs options tels le choix des fonctions d'onde initiales, le choix des coefficients, le choix de la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations intégro-différentielles ainsi que le choix de la méthode utilisée pour calculer les paramètres de Lagrange non-diagonaux.

Au cours des deux prochains chapitres, nous allons voir l'influence importante de la corrélation sur deux propriétés atomiques. Nous verrons, d'une part, son influence sur l'énergie de liaison totale (Chapitre IV) et, d'autre part, son influence sur la durée de vie du niveau métastable $^3P_2$ dans les gaz rares (Chapitre V).

Chapitre 4

Influence de la corrélation sur l'énergie de liaison totale dans les ions lourds

4.1 Introduction

Comme nous l'avons signalé au cours des chapitres précédents, il existe deux méthodes très employées pour résoudre le problème à plusieurs corps relativistes. Il s'agit, d'une part, de la méthode RMBPT basée sur une approche perturbative du problème et, d'autre part, de la méthode MCDF basée sur le principe variationnel. Toutes deux possèdent leurs avantages et leurs inconvénients. Il est donc intéressant de confronter les résultats obtenus par ces deux méthodes puisque celles-ci constituent des approximations du même problème. Dans les deux premiers articles, les deux méthodes ont été employées parallèlement afin de confronter leurs résultats. Quant au dernier article, dont le but est de fournir une évaluation systématique des énergies de liaison, seule la méthode MCDF a été utilisée puisqu'elle peut traiter des cas où la structure des couches externes est arbitraire.

4.2 Les résultats

4.2.1 L'influence des effets relativistes et à plusieurs corps sur les énergies de liaison totales du césium et d'autres ions fortement chargés

Résumé :
La détermination des masses atomiques à partir d'atomes fortement ionisés en

utilisant des pièges de Penning nécessite des valeurs précises des énergies de liaison électroniques. Dans ce travail, les énergies de liaisons de plusieurs ions (issus de divers éléments) sont calculées dans le cadre de deux méthodes à plusieurs corps relativistes : la théorie des perturbation à plusieurs corps relativistes (RMBPT) et la méthode Dirac-Fock multiconfigurée (MCDF). Les ions étudiés dans cet article sont : le Cl (He et Li-like), le Se (F et Ne-like), le Cs (He, Be, Ne, Al, Cl, Ar, K, Kr, Xe-like et le césium Cs neutre), le Hg, le Pb et le U (Br et Kr-like). Quelques uns de ces ions sont présentés dans l'article. Le césium a été étudié plus en détails, permettant une comparaison systématique entre les méthodes MCDF et RMBPT. Les énergies de liaison des ions Cs permettent une détermination de la masse atomique du Cs qui est utilisée dans une détermination, ne dépendant pas de la QED, de la constante de structure fine.

La possibilité offerte par les pièges à ions d'effectuer des mesures de masses ioniques de manière suffisament précise pour qu'elles soient sensibles aux énergies de liaison électroniques, a rendue intéressante l'étude de la précision des valeurs théoriques obtenues à l'aide de deux méthode de résolution approchée du problème à plusieurs corps : MCDF et RMBPT. L'article comprend deux parties. Dans la première partie, l'approximation[1] à la base des deux méthodes est rappelé. Cette dernière consite à utiliser l'hamiltonien sans-paire. L'expression du potentiel effective V_{ij} choisi pour rendre compte de l'interaction électron-électron est aussi donnée. Nous avons également rappelé comment s'effectue le calcul de la correlation dans les méthodes MCDF et RMBPT.

La seconde partie de l'article est consacrée aux résultats obtenus par les deux méthodes et à leur comparaison avec les résultats expérimentaux lorsque cela est possible. La principale origine de la différence entre les résultats obtenus avec la méthode MCDF et ceux obtenus avec la méthode RMBPT provient de ce que la méthode MCDF tient compte de façon incomplète de la corrélation lorsque plusieurs électrons sont présents. Cependant à la précision actuelle des résultats expérimentaux, l'approche MCDF telle qu'elle est mise en œuvre dans le programme MDFGME utilisé par notre équipe est largement suffisante pour fournir des valeurs précises des énergies de liaisons à partir d'ions lourds.

[1] Cette approximation a été étudiée dans le chapitre II de la thèse.

4.2.2 Applications des méthodes MCDF et RMBPT à des ions piégés

Résumé :

Nous présentons des résultats récents dans le domaine des calculs des énergies de liaison totales, des facteurs de Landé, des corrections d'électrodynamique quantique et des durées de vie. Ces derniers sont inéressants pour les pièges à ions et les sources d'ions. Nous décrivons en détails les calculs MCDF et RMBPT des énergies de liaisons ioniques, qui sont nécessaires pour la détermination des masses atomiques à partir de mesures réalisées sur des ions fortement chargés. Nous montrons également de nouveaux résultats concernant le facteur de Landé dans les ions à 3 électrons. Finalement, nous décrivons comment les calculs relativistes peuvent aider à comprendre la physique des ions lourds produits par les sources d'ions.

Après une première partie consacrée aux principes de base des deux méthodes utilisées, nous proccédons de nouveau à une comparaison des résulats obtenus, pour les énergies de liaison totale, avec les deux méthodes. Nous nous intéressons ensuite au facteur de Landé g_j qui a toujours constitué un sujet très étudié en spectroscopie de haute précision. Grâce aux développements des trappes à ions, il est maintenant possible d'obtenir des valeurs expérimentales de g_j. Ceci permet de juger de notre abilité à traiter de quantités combinant les effets relativistes et les effets à plusieurs corps. L'amélioration du programme MDFGME qui autorise désormais le calcul de ce facteur, a permis une comparaison avec les résultats obtenus par la méthode RMBPT. L'accord entre les résultats expérimentaux et ceux obtenus par les méthodes RMBPT et MCDF est bon, il sera toutefois nécéssaire dans l'avenir d'améliorer si cela est possible les valeurs théoriques.

4.2.3 Les calculs systématiques des énergies de liaison atomiques totales

Résumé :

Nous avons calculé, dans le modèle Dirac-Fock, les énergies de liaison totales des ions ayant de 3 à 92 électrons et ce pour tous les atomes de $Z = 3$ à $Z = 118$. Ceci a pour but la détermination des masses atomiques à partir d'ions fortement chargés. Au cours de ce travail nous avons déterminé la configuration fondamentale de nombreux ions pour lesquels, elle n'était pas connue. Nous avons également fourni la correlation électronique totale pour les séries iso-électroniques du béryllium, du néon, du magnesium et de l'argon, en incluant la corrélation de Breit et en utilisant l'approche multiconfigurationnelle de Dirac-Fock.

Dans ce travail, uniquement la méthode Dirac-Fock a été utilisée, à savoir le programme MDFGME en incluant une unique configuration. Comme nous l'avons noté dans les deux articles précédents, à l'heure actuelle une telle approche est suffisante étant donné la précision des résultats expérimentaux lorsque ces derniers sont disponibles. Cette approche nous a permis d'obtenir la configuration de l'état fondamental de nombreux ions lourds qui était jusqu'alors inconnue. Les énergies de liaison ont été évaluée avec un traitement complètement auto-cohérent du terme de Breit. L'énergie propre et l'énergie propre écrantée basée sur l'approximation de Welton ont été utilisées. Les diverses contributions à la polarisation du vide ont été également prises en compte. Donc dans ces différents calculs seule la correction de corrélation manque. Toutefois nous avons également éffectué des calculs multiconfigurés, c'est-à-dire qui inclus la corrélation, pour certains ions à couches fermés.

4.3 Conclusion

En citant une phrase de Hartree tirée de son livre [53] : "*One of the purpose of the calculation of atomic structures is to provide data for the evaluation of atomic properties not accessible to direct observation*", nous voyons que ce but a été atteint. En effet, en dehors de quelques ions Cs, les valeurs expérimentales ne sont pour le moment pas disponibles ou alors l'incertitude de l'ordre de quelques centaines d'eV de ces valeurs ne permet pas une comparaison avec les résultats théoriques.

Chapitre 5

Influence de la corrélation sur les probabilités de transition dans les gaz rares (Ne, Ar, Kr et Xe)

5.1 Introduction

La corrélation joue un rôle important dans le calcul d'autres quantités que celles de l'énergie. Nous allons voir dans ce chapitre son influence sur les durées de vie des états atomiques. Pour cela, nous avons choisi l'état $^3P_2$ des gaz rares Ne, Ar, Kr et Xe. Cet état est un état métastable puisqu'il ne peut se déexcité vers le fondamental $^1S_0$ que grâce à une transition dipolaire magnétique $M2$.

L'importance d'une telle étude provient du fait qu'elle permet de tester la précision de la fonction d'onde obtenue en dehors de l'évaluation de l'énergie. En effet la méthode MCDF, basée sur un principe variationnel dans lequel l'energie est rendue stationnaire par rapport aux variations de la fonction d'onde, est moins sensible aux changements de la fonction d'onde que le sont des quantités comme les durées de vie. Ces dernières offrent l'un des exemple les plus intéressant de l'effet de la corrélation.

5.2 Méthode et options de calculs

Nous avons utilisé le programme MDFGME dont nous avons parlé dans le troisième chapitre. A cette occasion, nous avions signalé que celui-ci offrait beaucoup d'options de calculs. Nous avons choisi de prendre complètement

en compte le terme de Breit, mais ceci de deux manières différentes. Dans un cas, nous l'avons traité de façon perturbative et, dans l'autre cas, nous l'avons inclu à chaque étape du processus auto-cohérent.

Le calcul des durées de vie passe par l'évaluation des éléments de matrice de l'opérateur multipolaire mis en jeu dans la transition étudiée. Cependant, lorsqu'on effectue des calculs avec la méthode Dirac-Fock multiconfigurée, nous devons évaluer des éléments de matrice non-diagonaux d'opérateurs à un électron. Par non-diagonaux, nous entendons ici entre deux états appartenant à des configurations différentes. Or, le potentiel complet des méthodes MCDF pour la corrélation ne peut être obtenu que si les fonctions d'onde de chaque état mis en jeu sont optimisées séparément (OL). Toutefois, la méthode d'optimisation des niveaux présente un défaut important : les spin-orbitales de même symétrie dans les états initial et final ne sont pas orthogonales. Nous avons tenu compte de ceci dans nos calculs grâce à une option du programme MDFGME permettant de tenir donc de la non-orthogonalité entre les orbitales des états initial et final.

5.3 Les résultats

Les cas auto-cohérents pour le krypton et le xénon sont en cours de réalisation.

5.3.1 Le néon

TAB. 5.1 – Breit en perturbation

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energies de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1$	$1s^2 2s^2 2p^6$	15.03642	38.2366
	$+..2p^3 3s^1 3p^2$	$+..2p^4 3s^2$	13.62859	62.0428
	$+..2p^3 3s^1 3d^2$	$+..2p^4 3p^2$	14.49786	39.1413
	$+..2p^3 3s^1 4s^2$	$+..2p^4 3d^2$	16.51139	21.4994
	$+..2p^3 3s^1 4p^2$	$+..2p^4 4s^2$	16.44178	21.9775
	$+..2p^3 3s^1 4d^2$	$+..2p^4 4p^2$	16.45758	21.9840
	$+..2p^3 3s^1 4f^2$	$+..2p^4 4d^2$	16.46232	22.0502
	$+..2p^3 3s^1 5s^2$	$+..2p^4 4f^2$	16.67565	20.8028
	$+..2p^3 3s^1 5p^2$	$+..2p^4 5s^2$	16.66766	20.8618
	$+..2p^3 3s^1 5d^2$	$+..2p^4 5p^2$	16.68377	20.7560
	$+..2p^3 3s^1 5f^2$	$+..2p^4 5d^2$	16.66505	20.9828
		$+..2p^4 5f^2$	16.69830	20.7742
	$+..2p^1 3s^1 3p^4$	$+..2p^2 3p^4$	16.72400	20.5414
	$+..2p^1 3s^1 3d^4$	$+..2p^2 3d^4$	16.73173	20.6102
	$+..2p^1 3s^1 4p^4$	$+..2p^2 4p^4$	16.73632	20.4677
	$+..2p^5 3d^1$	$+..2p^2 4d^4$	16.73131	21.0600
	$+..2p^3 3s^2 3d^1$	$+..2s^1 2p^5 3s^1 3p^1$	17.63803	16.0201
		$+1s^2 2p^6 3s^2$	17.70002	15.9121
		$+1s^2 2p^6 3p^2$	17.72030	15.8092
	$+1s^2 2s^1 2p^5 3s^2$	$+1s^2 2p^6 3d^2$	17.83207	15.3596

TAB. 5.2 – Breit auto-cohérent

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energies de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^1$	$1s^2 2s^2 2p^6$	15.03642	38.2347
	$+..2p^3 3s^1 3p^2$	$+..2p^4 3s^2$	13.62858	62.0399
	$+..2p^3 3s^1 3d^2$	$+..2p^4 3p^2$	14.49785	39.1391
	$+..2p^3 3s^1 4s^2$	$+..2p^4 3d^2$	16.51139	21.4996
	$+..2p^3 3s^1 4p^2$	$+..2p^4 4s^2$	16.44174	21.9780
	$+..2p^3 3s^1 4d^2$	$+..2p^4 4p^2$	16.45757	21.9844
	$+..2p^3 3s^1 4f^2$	$+..2p^4 4d^2$	16.46235	22.0505
	$+..2p^3 3s^1 5s^2$	$+..2p^4 4f^2$	16.67568	20.8032
	$+..2p^3 3s^1 5p^2$	$+..2p^4 5s^2$	16.66769	20.8621
	$+..2p^3 3s^1 5d^2$	$+..2p^4 5p^2$	16.68380	20.7563
	$+..2p^3 3s^1 5f^2$	$+..2p^4 5d^2$	16.66509	20.9833
		$+..2p^4 5f^2$	16.69834	20.7746
	$+..2p^1 3s^1 3p^4$	$+..2p^2 3p^4$	16.72401	20.5418
	$+..2p^1 3s^1 3d^4$	$+..2p^2 3d^4$	16.73178	20.6107
	$+..2p^1 3s^1 4p^4$	$+..2p^2 4p^4$	16.73636	20.4681
	$+..2p^5 3d^1$	$+..2p^2 4d^4$	16.73136	21.0608
	$+..2p^3 3s^2 3d^1$	$+..2s^1 2p^5 3s^1 3p^1$	17.63805	16.0206
		$+1s^2 2p^6 3s^2$	17.69998	15.9138
		$+1s^2 2p^6 3p^2$	17.72032	15.8096
	$+1s^2 2s^1 2p^5 3s^2$	$+1s^2 2p^6 3d^2$	17.83215	15.3598

5.3.2 L'argon

TAB. 5.3 – Breit en perturbation

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energies de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^1$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	10.81070	65.9508
	$+..3p^3 3d^2 4s^1$	$+..3p^4 3d^2$	11.57877	52.2327
	$+..3p^3 4s^1 4p^2$	$+..3p^4 4s^2$	11.19257	61.0978
	$+..3p^3 4s^1 4d^2$	$+..3p^4 4p^2$	11.78667	43.4526
	$+..3p^3 4s^1 4f^2$	$+..3p^4 4d^2$	11.67376	45.7450
	$+..3p^3 4s^1 5s^2$	$+..3p^4 4f^2$	11.91953	41.6181
	$+..3p^3 4s^1 5p^2$	$+..3p^4 5s^2$	11.90109	41.9670
	$+..3p^3 4s^1 5d^2$	$+..3p^4 5p^2$	11.93396	41.4012
	$+..3p^3 4s^1 5f^2$	$+..3p^4 5d^2$	11.93578	41.4681
	$+..3p^1 3d^4 4s^1$	$+..3p^2 3d^4$	11.97587	41.0941
	$+..3p^1 4s^1 4p^4$	$+..3p^2 4p^4$	11.98429	40.8207

TAB. 5.4 – Breit auto-cohérent

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energies de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^1$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	10.81070	65.9437
	$+..3p^3 3d^2 4s^1$	$+..3p^4 3d^2$	11.57877	52.2297
	$+..3p^3 4s^1 4p^2$	$+..3p^4 4s^2$	11.19257	61.0940
	$+..3p^3 4s^1 4d^2$	$+..3p^4 4p^2$	11.78664	43.4502
	$+..3p^3 4s^1 4f^2$	$+..3p^4 4d^2$	11.67377	45.7418
	$+..3p^3 4s^1 5s^2$	$+..3p^4 4f^2$	11.91953	41.6153
	$+..3p^3 4s^1 5p^2$	$+..3p^4 5s^2$	11.90106	41.9648
	$+..3p^3 4s^1 5d^2$	$+..3p^4 5p^2$	11.93399	41.3982
	$+..3p^3 4s^1 5f^2$	$+..3p^4 5d^2$	11.93576	41.4659
	$+..3p^1 3d^4 4s^1$	$+..3p^2 3d^4$	11.97590	41.0898
	$+..3p^1 4s^1 4p^4$	$+..3p^2 4p^4$	11.98427	40.8174
	$+..3p^1 4s^1 4d^4$	$+..3p^2 4d^4$	11.98030	41.0476

5.3.3 Le krypton

TAB. 5.5 – Breit en perturbation

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energie de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$[Ar]3d^{10}4s^24p^55s^1$	$[Ar]3d^{10}4s^24p^6$	9.30910	86.6425
	$+..\mathbf{4p^54d^1}$	$+...4p^44d^2$	11.75698	17.8259
	$+..4p^34d^15s^2$	$+..4p^45s^2$	11.77933	17.4001
	$+..4p^34d^15p^2$	$+..4p^45p^2$	12.24842	12.7174
	$+..4p^34d^15d^2$	$+..4p^45d^2$	12.26353	7.1193
	$+..4p^35s^15p^2$	$+..4p^55p^1$	11.94986	10.3720
	$+..4p^35s^15d^2$	$+..4p^44d^15s^1$	10.75833	25.7886
	$+..4p^34d^14f^2$	$+..4p^44f^2$	11.05868	21.8390
	$+..4p^35s^14f^2$	$+..4p^54f^1$	10.81063	25.4930
	$+..4p^34d^3$	$+..4p^24d^4$	10.87133	24.6971

5.3.4 Le xénon

TAB. 5.6 – Breit en perturbation

	Initial $^3P_2$	Final $^1S_0$	Energies de transition (eV)	$\tau(^3P_2)$ (s)
M2	$[Kr]4d^{10}5s^25p^56s^1$	$[Kr]4d^{10}5s^25p^6$	7.83214	135.9149
	$+..\mathbf{5s^25p^55d^1}$	$+..5s^25p^45d^2$	9.87723	22.7775
	$+..5s^25p^35d^16s^2$	$+..5s^25p^46s^2$	9.89457	22.1792
	$+..5s^25p^35d^16p^2$	$+..5s^25p^46p^2$	10.23546	16.4968
	$+..5s^25p^35d^16d^2$	$+..5s^25p^46d^2$	10.23845	9.4963
	$+..5p^36s^16p^2$	$+..5p^56p^1$	10.01236	13.2307
	$+..5p^36s^16d^2$	$+..5p^45d^16s^1$	9.24365	29.6958
	$+..5p^36s^26d^1$	$+..5p^46s^16d^1$	9.28425	28.5620
	$+..5p^35d^3$	$+..5p^25d^4$	9.33522	27.0201
	$+..5p^15d^16p^4$	$+..5p^26p^4$	9.34984	26.9449
	$+..5p^15d^16d^4$	$+..5p^26d^4$	9.35433	26.8832
	$+..5p^16s^16p^4$	$+..5p^36p^3$	9.34005	26.8953
	$+..5p^16s^16d^4$	$+..5p^25d^36s^1$	9.37345	27.0221
	$+..5s^15p^55d^2$	$+..5s^15p^66s^1$	9.33455	25.7566

5.4 Discussion

Bien que les calculs utilisant la méthode MCDF doivent être faits de manière systèmatique, à la différence des calculs d'énergie totale comme ceux dont nous avons parlé au quatrième chapitre, les calculs de probabilités de transition présentent cette difficulté supplémentaire : la corrélation doit être répartie de façon équilibrée entre les états initial et final. Dans tous nos calculs, nous avons essayé de répartir de manière égale les corrélations et de tenir compte des plus importantes. Afin de montrer le rôle important que joue l'inclusion dans l'état initial de la configuration p^5d^1, nous avons effectué les calculs dans le néon et l'argon en ne l'introduisant que tardivement. Avant son introduction, les résultats obtenus étaient similaires à ceux de la référence [113] bien qu'un peu plus petits, ces différences provenant de l'amélioration de la prise en compte du retard dans le programme MDFGME. Une fois que celle-ci est prise en compte, nous voyons une diminution de la durée de vie.

En ce qui concerne les éléments lourds (Kr et Xe), nous avons introduit, dès le début, cette configuration p^5d^1. En effet, ces derniers sont extrêmement sensibles, d'une part, aux effets relativistes et, d'autre part, à la corrélation.

TAB. 5.7 – Durées de vie : $\tau(^3P_2)$ (sec)

	Ne	Ar	Kr	Xe
N.E. Small-Warren et al. (1975) $[114]_{\text{th}}$	24.4	55.9	85.1	149.5
P. Indelicato et al. $[113]_{\text{th}}$	22	51	63	96
H. Katori et al. (1993)$[115]_{\text{exp}}$		38^{+8}_{-5}	39^{+5}_{-4}	
M. Walhout et al.(1994) $[116]_{\text{exp}}$				42.9(9)
G. Birkl et al. (2002)$[117]_{\text{exp}}$	14.7			
M. Walhout et al. (2002) $[118]_{\text{exp}}$			28.3	
Nos résultats DF (2002)	38.2	52.2	86.6	135.9
Nos résultats MCDF (2002)	15.3	40.8	24.6	26.8

Dans ce tableau, les indices th ou exp font référence à des résultats théoriques ou expérimentaux.

5.5 Conclusion

Nous avons vu que les états métastables sont très sensibles à la corrélation de valence. En effet, alors que ces corrélations affectent peu l'énergie, elles changent la durée de vie de l'état $^3P_2$ d'une manière considérable. L'inclusion d'une unique configuration à l'état initial et à l'état final peut diminuer $\tau(^3P_2)$

d'un facteur 5. Dans ce travail, nous avons trouvé des valeurs très proches des dernières mesures expérimentales effectuées à la différence des résultats théoriques antérieurs qui conduisaient à des valeurs très supérieures à celles que trouvaient les équipes expérimentales.

Une nouvelle version du programme MDFGME vient d'être mise au point. Celle-ci permet de générer les configurations et de calculer les différentes contributions des multipôles susceptibles de relier deux états atomiques donnés. Nous sommes actuellement occupés à compléter les calculs concernant les gaz rares (en incluant plus de configurations) et nous pensons obtenir de meilleurs résultats d'ici le mois de septembre.

Chapitre 6

Transitions à 2-photons dans les atomes à N-électrons

6.1 Introduction

Nous avons établi une expression du taux de désintégration spontanée sous une forme adaptée au programme de J.P. Desclaux et de P. Indelicato. Ce travail a été commencé par J.P. Santos, F. Parente et P. Indelicato [119]. Ils se sont intéressés aux transitions à deux photons dans les systèmes hydrogénoïdes. Cette étude leur a permis de mettre en place tous les outils nécessaires à la détermination des éléments de matrice radiaux à un électron et que nous retrouvons dans la formule générale à N-électrons étant donné que les opérateurs multipolaires sont des opérateurs à 1 électron. Pour le calcul de ces éléments, ils ont développés les parties radiales des fonctions d'onde mono-électroniques sur une base de B-spline.

La mise au point de l'expression dans les cas de systèmes comportant N-électrons a débuté par une généralisation au cas à deux électrons, celle-ci ayant donné lieu à un article que l'on trouvera dans la seconde partie du chapitre. Nous ne rappellerons pas l'intérêt de l'étude des transitions à 2 photons ni leur historique dans la première partie de ce chapitre car tous ces renseignements se trouvent dans l'article donné en fin de chapitre. Mais il est tout de même judicieux de préciser que le calcul des transitions à deux photons est intéressant, d'une part, pour les expériences destinées à mettre en évidence la violation de parité et, d'autre part, dans le calcul du déplacement de Lamb [120].

6.2 Transitions à deux photons dans la méthode MCDF

6.2.1 Introduction

Dans le modèle MCDF, les fonctions d'état de configuration (CSF) Φ sont construites en prennant des combinaisons linéaires de déterminants de Slater, de sorte que celles-ci sont états propres de l'opérateur J^2. Une fonction d'état atomique (ASF) pour un état j est alors construite à partir des CSF selon :

$$\Psi_j(\Pi_j J_j M_j) = \sum_{a=1}^{n_j} c_{ja} \Phi^a(\gamma_j^a \Pi_j J_j M_j), \tag{6.1}$$

avec n_j, le nombre de CSF entrant dans la composition de la fonction d'état atomique (ASF) et γ^a représentant toutes les autres quantités nécessaires pour définir de manière unique la CSF n°a. Nous avons donc pour l'état initial :

$$|i\rangle = \Psi_i(\Pi_i J_i M_i) = \sum_{r=1}^{n_i} c_{ir} \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i), \tag{6.2}$$

et pour l'état final :

$$|f\rangle = \Psi_f(\Pi_f J_f M_f) = \sum_{t=1}^{n_f} c_{ft} \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \tag{6.3}$$

6.2.2 Transitions à 2 photons

Nous avons (en u.a.) :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2} \left| \sum_m \frac{\langle f| A^{(\lambda_2)}_{L_2M_2}(\omega_2) |m\rangle \langle m| A^{(\lambda_1)}_{L_1M_1}(\omega_1) |i\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} + \sum_m \frac{\langle f| A^{(\lambda_1)}_{L_1M_1}(\omega_1) |m\rangle \langle m| A^{(\lambda_2)}_{L_2M_2}(\omega_2) |i\rangle}{E_m - E_i + \omega_2} \right|^2 d\Omega_1 d\Omega_2 \tag{6.4}$$

soit :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega_1 d\Omega_2$$

$$\times \left| \sum_{t,r} c_{ft} c_{ir} \sum_m \left(\frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_2 |m\rangle \langle m| A_1 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} + \frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Phi_f J_f M_f) \middle| A_1 |m\rangle \langle m| A_2 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_2} \right) \right|^2,$$

avec $A_1 = A^{(\lambda_1)}_{L_1M_1}(\omega_1)$ et $A_2 = A^{(\lambda_2)}_{L_2M_2}(\omega_2)$.
La somme sur m comprend toutes les CSF $\Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m)$ pouvant être couplées aux $\Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i)$ et aux $\Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f)$. Nous avons donc :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega_1 d\Omega_2$$

$$\times \left| \sum_{t,r} c_{ft} c_{ir} \sum_m \left(\frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_2 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) | A_1 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} \right.$$

$$\left. + \frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_1 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) | A_2 \middle| \Phi(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_2} \right) \right|^2$$

avec :

$$\sum_m \rightarrow \sum_{\gamma_m, J_m, M_m} \tag{6.5}$$

D'où :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega_1 d\Omega_2$$

$$\times \left| \sum_{t,r} c_{ft} c_{ir} \sum_{\gamma_m J_m, M_m} \left(\frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_2 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) | A_1 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} \right.$$

$$\left. + \frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_1 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m) | A_2 \middle| \Phi(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i) \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_2} \right) \right|^2$$

Soit :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega_1 d\Omega_2 \left| \sum_{t,r} c_{ft} c_{ir} \left[\left(B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} \right)_{t,r} + \left(B_{L_2 M_2 \lambda_2}^{L_1 M_1 \lambda_1} \right)_{t,r} \right] \right|^2 \tag{6.6}$$

avec :

$$\left(B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} \right)_{t,r} = \sum_{\gamma_m, J_m, M_m} \frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_2 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m | A_1 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} \tag{6.7}$$

et :

$$\left(B_{L_2 M_2 \lambda_2}^{L_1 M_1 \lambda_1} \right)_{t,r} = \sum_{\gamma_m, J_m, M_m} \frac{\left\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f M_f) \middle| A_1 | \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m \right\rangle \left\langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m M_m | A_2 \middle| \Phi^r(\gamma_i^r \Pi_i J_i M_i \right\rangle}{E_m - E_i + \omega_2} \tag{6.8}$$

Développons le carré :

$$\frac{dW}{d\omega_1} = \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega_1 d\Omega_2 \sum_{t,t',r,r'} c_{ft} c_{ft'} c_{ir} c_{ir'} \left[\left(B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} \right)_{t,r} + \left(B_{L_2 M_2 \lambda_2}^{L_1 M_1 \lambda_1} \right)_{t,r} \right]$$

$$\times \left[\left(B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} \right)_{t',r'} + \left(B_{L_2 M_2 \lambda_2}^{L_1 M_1 \lambda_1} \right)_{t',r'} \right]$$

et appliquons le théorème de Wigner-Eckart :

$$\left(B_{L_1 M_1 \lambda_1}^{L_2 M_2 \lambda_2} \right)_{t,r} = \sum_{\gamma_m J_m M_m} (-1)^{J_f - M_f + J_m - M_m} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}$$

$$\times \frac{\langle \Phi^t(\gamma_f^t \Pi_f J_f) \left\| A_{L_2}^{(\lambda_2)}(\omega_2) \right\| \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m) \rangle \langle \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m) \left\| A_{L_1}^{(\lambda_1)}(\omega_1) \right\| \Phi_i^r(\gamma^r \Pi_i J_i) \rangle}{E_n - E_i + \omega_1}$$

Posons :

$$\begin{aligned}
\Xi^{J_m} &= \sum_{M_m} (-1)^{J_f - M_f + J_m - M_m} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{J_f + J_m} \sum_{M_m} (-1)^{-(M_f + M_m)} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{J_f + J_m + 1} \sum_{M_m} (-1)^{M_f + M_m + 1} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix} \\
&= \frac{(-1)^{J_f + J_m + 1}}{\sqrt{2J_m + 1}} \sum_{M_m} \sqrt{2J_m + 1} (-1)^{M_f + M_m + 1} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

soit :

$$\Xi^{J_m}(2,1) = \frac{(-1)^{J_f + J_m + 1}}{\sqrt{2J_m + 1}} \Theta^{J_m}(2,1), \tag{6.9}$$

où $\Theta^{J_m}(2,1)$ est similaire au facteur donné dans l'article de Goldman-Drake (2.24) [121].

Définissons :

$$S^{J_m}_{t,r}(2,1) = \sum_{\gamma_m} \frac{\langle \Phi^t(\gamma^t_f \Pi_f J_f) \left|\left| A^{(\lambda_2)}_{L_2}(\omega_2) \right|\right| \Phi^m(\gamma_m \Pi_m J_m) \rangle \langle \Phi^n(\gamma_m \Pi_m J_m) \,||\, A^{(\lambda_1)}_{L_1}(\omega_1) \,||\, \Phi^r_i(\gamma^r \Pi_i J_i) \rangle}{E_m - E_i + \omega_1} \tag{6.10}$$

Après voir sommé sur M_f et moyenné sur M_i, nous avons pour L_1, λ_1, L_2 et λ_2 fixés :

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{W}}{d\omega_1} &= \frac{\omega_1 \omega_2}{(2\pi)^3 c^2 (2J_i + 1)} \sum_{t,t',r,r'} c_{ft} c_{ir} c_{ft'} c_{ir'} \\
\times \sum_{M_1 M_2 M_f M_i J_m J'_m} & \Big(\Big[\Xi^{J_m}(2,1) \Xi^{J'_m}(2,1) S^{J_m}_{t,r}(2,1) S^{J'_m}_{t',r'}(2,1) \Big] \\
&+ \Big[\Xi^{J_m}(1,2) \Xi^{J'_m}(1,2) S^{J_m}_{t,r}(1,2) S^{J'_m}_{t',r'}(1,2) \Big] \\
&+ 2 \times \Big[\Xi^{J_m}(2,1) \Xi^{J'_m}(1,2) S^{J_m}_{t,r}(2,1) S^{J'_m}_{t',r'}(1,2) \Big] \Big)
\end{aligned}$$

où les coefficients Ξ^{J_m} contiennent les sommes sur les nombres quantiques magnétiques intermédiaires et les coefficients S^{J_m} contiennent les sommes sur les indices γ_m intermédiaires.

En utilisant les règles de sommation :

$$\sum_{M_1 M_2 M_f M_i} \Xi^{J_m}(2,1) \Xi^{J'_m}(2,1) = \frac{\delta_{J_m, J'_m}}{2J_m + 1} \tag{6.11}$$

et :

$$\sum_{M_1 M_2 M_f M_i} \Xi^{J_m}(2,1)\Xi^{J'_m}(1,2) = (-1)^{J_m+J'_m+L_1+L_2} \left\{ \begin{array}{ccc} J_f & J'_m & L_1 \\ J_i & J_m & L_2 \end{array} \right\} \quad (6.12)$$

Nous obtenons finalement :

$$\frac{d\bar{W}}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2 (2J_i+1)} \sum_{t,r,t',r'} c_{ft}c_{ir}c_{ft'}c_{ir'}$$

$$\times \sum_{J_m} \left(\frac{1}{2J_m+1} \left[S^{J_m}_{t,r}(2,1) S^{J_m}_{t',r'}(2,1) \right] + \frac{1}{2J_m+1} \left[S^{J_m}_{t,r}(1,2) S^{J_m}_{t',r'}(1,2) \right] \right.$$

$$\left. +2 \times \sum_{J'_m} (-1)^{J_m+J'_m+L_1+L_2} \left\{ \begin{array}{ccc} J_f & J'_m & L_1 \\ J_i & J_m & L_2 \end{array} \right\} \left[S^{J_m}_{t,r}(2,1) S^{J'_m}_{t',r'}(1,2) \right] \right)$$

Expression de l'élément de matrice réduit d'un opérateur à 1 électron pris entre deux CSF

Les opérateurs $A^{(\lambda)}_{LM}$ intervenant dans l'expression du taux de désintégration spontanée sont des opérateurs à 1 électron. Nous avons donc :

$$\langle \nu_F J_F M_F | A^{(\lambda)}_{LM} | \nu_I J_I M_I \rangle = \langle \nu_F J_F M_F | \sum_{i=1}^{N} \tilde{a}^{(\lambda)}_{LM}(\mathbf{r}_i) | \nu_I J_I M_I \rangle$$

Or $|\nu_I J_I M_I\rangle$ et $|\nu_F J_F M_F\rangle$ sont des C.S.F. et nous notons D^j les déterminants appartenant à une fonction d'état de configuration donnée, soit :

$$\langle \nu_F J_F M_F | A^{(\lambda)}_{LM} | \nu_I J_I M_I \rangle = \sum_{k,l} d_k d_l \left\langle D^k \right| \sum_{i=1}^{N} \tilde{a}^{(\lambda)}_{LM}(\mathbf{r}_i) \left| D^l \right\rangle$$

$$= \sum_{k,l} d_k d_l \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d\mathbf{r} \left| \begin{array}{ccc} \psi^{k\dagger}_\alpha(\mathbf{r}_1) & ... & \psi^{k\dagger}_\nu(\mathbf{r}_1) \\ ... & ... & ... \\ \psi^{k\dagger}_\alpha(\mathbf{r}_N) & ... & \psi^{k\dagger}_\nu(\mathbf{r}_N) \end{array} \right| \left(\sum_{i=1}^{N} \tilde{a}^{(\lambda)}_{LM}(\mathbf{r}_i) \right) \frac{1}{\sqrt{N!}} \left| \begin{array}{ccc} \psi^{l}_\alpha(\mathbf{r}_1) & ... & \psi^{l}_\nu(\mathbf{r}_1) \\ ... & ... & ... \\ \psi^{l}_\alpha(\mathbf{r}_N) & ... & \psi^{l}_\nu(\mathbf{r}_N) \end{array} \right|$$

avec $d\mathbf{r} = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 .... d\mathbf{r}_N$. Dans la suite, nous notons les déterminants sous la forme :

$$D = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\gamma(\mathbf{r}_3)...\psi_\nu(\mathbf{r}_N),$$

la somme étant prise sur toutes les permutations des indices $\mathcal{P}\,[\alpha, \beta, ..., \nu]$ et $(-1)^{\mathcal{P}}$ étant la parité de la permutation.

Soit :

$$\langle \nu_F J_F M_F | A_{LM}^{(\lambda)} | \nu_I J_I M_I \rangle = \sum_i \sum_{k,l} d_k d_l \frac{1}{N!} \int d\mathbf{r}$$

$$\times \left[\sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \psi_f^{k\dagger}(1) \psi_\beta^{k\dagger}(2) ... \psi_\nu^{k\dagger}(N) . \tilde{a}_{LM}^{(\lambda)}(r_i) . \sum_{\mathcal{P}'} (-1)^{\mathcal{P}'} \psi_i^l(1) \psi_{\beta'}^l(2) ... \psi_{\nu'}^l(N) \right]$$

En utilisant l'argument de Löwdin et en supposant que les fonctions d'onde mono-électroniques appartiennent à deux CSF différentes et qu'elles sont orthonormées, nous obtenons **:**

$$\langle \nu_F J_F M_F | A_{LM}^{(\lambda)} | \nu_I J_I M_I \rangle = \sum_{k,l} d_k d_l \sum_{\mathcal{P}'} (-1)^{\mathcal{P}'} \int d\mathbf{r} \psi_f^{k\dagger}(\mathbf{r}) \tilde{a}_{LM}^{(\lambda)}(\mathbf{r}) \psi_i^l(\mathbf{r}) \delta_{\beta\beta'} ..... \delta_{\nu\nu'}$$

soit :

$$\langle \nu_F J_F M_F | A_{LM}^{(\lambda)} | \nu_I J_I M_I \rangle = \sum_{k,l} d_k d_l \sum_{\mathcal{P}'} (-1)^{\mathcal{P}'} \left\langle n_f^k \kappa_f^k j_f^k m_f^k \left| \tilde{a}_{LM}^{(\lambda)} \right| n_i^l \kappa_i^l j_i^l m_i^l \right\rangle \tag{6.13}$$

En utilisant le théorème de Wigner-Eckart, nous avons :

$$\begin{aligned} & (-)^{J_F - M_F} \begin{pmatrix} J_F & L & J_I \\ -M_F & M & M_I \end{pmatrix} \left\langle \nu_F J_F \left\| A_L^{(\lambda)} \right\| \nu_I J_I \right\rangle \\ = & \sum_{k,l,\mathcal{P}'} d_k d_l (-1)^{\mathcal{P}'} (-)^{j_f^k - m_f^k} \begin{pmatrix} j_f^k & L & j_i^l \\ -m_f^k & M & m_i^l \end{pmatrix} \left\langle n_f^k \kappa_f^k j_f^k \left\| \tilde{a}_L^{(\lambda)} \right\| n_i^l \kappa_i^l j_i^l \right\rangle \end{aligned}$$

soit :

$$\left\langle \nu_F J_F \left\| A_L^{(\lambda)} \right\| \nu_I J_I \right\rangle = \sum_{k,l,\mathcal{P}'} d_k d_l (-1)^{\mathcal{P}'} \frac{(-)^{j_f^k - m_f^k} \begin{pmatrix} j_f^k & L & j_i^l \\ -m_f^k & M & m_i^l \end{pmatrix}}{(-)^{J_F - M_F} \begin{pmatrix} J_F & L & J_I \\ -M_F & M & M_I \end{pmatrix}} \left\langle n_f^k \kappa_f^k j_f^k \left\| \tilde{a}_L^{(\lambda)} \right\| n_i^l \kappa_i^l j_i^l \right\rangle \tag{6.14}$$

avec :

$$\left\langle n_f^k \kappa_f^k j_f^k \left\| \tilde{a}_L^{(\lambda)} \right\| n_i^l \kappa_i^l j_i^l \right\rangle = (-i)^{L+\lambda-1} (-1)^{j_f - 1/2} \left(\sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \right)^{\frac{1}{2}} [j_f, j_i]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_f & L & j_i \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \bar{M}_{fi}^{(\lambda,L)}$$

Expressions des coefficients $\mathbf{S^{J_m}_{t,r}(2,1)}$

Nous avons :

$$\Phi^r(\gamma^r\Pi_i J_i M_i) = \sum_{a=1} d^r_a D^r_a \quad \text{avec} \quad D^r_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1^{a,r}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi_N^{a,r}(\vec{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1^{a,r}(\vec{r}_N) & \cdots & \phi_N^{a,r}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

$$\Phi^m(\gamma_m\Pi_m J_m M_m) = \sum_{b=1} d^m_b D^m_b \quad \text{avec} \quad D^m_b = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1^{b,m}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi_N^{b,m}(\vec{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1^{b,m}(\vec{r}_N) & \cdots & \phi_N^{b,m}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

$$\Phi^t(\gamma^t\Pi_f J_f M_f) = \sum_{c=1} d^t_c D^t_c \quad \text{avec} \quad D^t_c = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1^{c,t}(\vec{r}_1) & \cdots & \phi_N^{c,t}(\vec{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1^{c,t}(\vec{r}_N) & \cdots & \phi_N^{c,t}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

où les ϕ sont des bispineurs de Dirac.

En utilisant (6.14), nous pouvons maintenant en déduire les expressions des coefficients $S^{J_m}_{t,r}(2,1)$:

$$S^{J_m}_{t,r}(2,1) = \sum_{\gamma_m} \frac{\langle \Phi^t(\gamma^t_f\Pi_f J_f)\|A^{(\lambda_2)}_{L_2}(\omega_2)|\Phi^m(\gamma_m\Pi_m J_m)\rangle\langle\Phi^m(\gamma_m\Pi_m J_m)\|A^{(\lambda_1)}_{L_1}(\omega_1)\|\Phi^r(\gamma^r_i\Pi_i J_i)\rangle}{E_m - E_i + \omega_1}$$

Or γ_m représente l'ensemble des autres nombres quantiques (configurations, coefficients de séniorité, ...) susceptibles de différentier deux CSF de même Π_m, J_m et M_m. Il peut être remplacé par n^m,le nombre quantique principal des orbitales intermédiaires pouvant être occupées par l'électron actif et nous avons :

$$S^{J_m}_{t,r}(2,1) = \left[\sum_{c,b,b',a} d^t_c d^m_b d^m_{b'} d^r_a \sum_{\mathcal{P}\mathcal{P}'} (-1)^{\mathcal{P}+\mathcal{P}'} \frac{(-1)^{j^t_c - m^t_c} \begin{pmatrix} j^t_c & L_2 & j^m_b \\ -m^t_c & M_2 & m^m_b \end{pmatrix}}{(-1)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{(-1)^{j_{b'} - m_{b'}} \begin{pmatrix} j^m_{b'} & L_1 & j^r_a \\ -m^m_{b'} & M_1 & m^r_a \end{pmatrix}}{(-1)^{J_n - M_n} \begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} \right.$$
$$\left. \times \sum_{n^m} \frac{\langle n^t_c \kappa^t_c j^t_c \|\tilde{a}^{\lambda_2}_{L_2}(\omega_2)\| n^m \kappa^m_b j^m_b\rangle\langle n^m \kappa^m_{b'} j^m_{b'}\|\tilde{a}^{\lambda_1}_{L_1}(\omega_1)\| n^r_a \kappa^r_a j^r_a\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} \right]$$

Cependant, j^m_b est toujours égal à $j^m_{b'}$ de même que κ^m_b et $\kappa^m_{b'}$ sont égaux puisqu'ils servent à construire la même CSF intermédiaire. Posons alors $j^m_b = j^m_{b'} = j^m$ et $\kappa^m_b = \kappa^m_{b'} = \kappa^m$. Nous avons alors l'expression suivante :

$$\sum_{n_m} \frac{\langle n^t_c \kappa^t_c j^t_c \|\tilde{a}^{\lambda_2}_{L_2}(\omega_2)\| n^m \kappa^m j^m\rangle\langle n^m \kappa^m j^m \|\tilde{a}^{\lambda_1}_{L_1}(\omega_1)\| n^r_a \kappa^r_a j^r_a\rangle}{E_m - E_i + \omega_1} = \sqrt{2j^m+1} \times (-1)^{j^t_c + j^m - 1} S^{j^m}_{t,r}(2,1) \tag{6.15}$$

où $S_{t,r}^{j^m}(2,1)$ est le coefficient (2.23) donné dans l'article de Goldman-Drake[1] [121].

Nous obtenons finalement :

$$S_{t,r}^{J_m}(2,1) = \sqrt{2j^m+1}\left[\sum_{c,b,b',a} d_c^t d_b^m d_{b'}^m d_a^r \sum_{\mathcal{P}\mathcal{P}'}(-1)^{\mathcal{P}+\mathcal{P}'} \frac{(-1)^{j_c^t-m_c^t}\begin{pmatrix} j_c^t & L_2 & j^m \\ -m_c^t & M_2 & m_b^m \end{pmatrix}}{(-1)^{J_f-M_f}\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \times \frac{(-1)^{j^m-m_{b'}^m}\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_1 & m_a^r \end{pmatrix}}{(-1)^{J_m-M_m}\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}}(-1)^{j_c^t+j^m-1} S_{t,r}^{j^m}(2,1)\right] \tag{6.16}$$

Or $2(j_c^t + j^m)$ est pair, d'où :

$$S_{t,r}^{J_m}(2,1) = \sqrt{2j^m+1}\left[\sum_{c,b,b',a} d_c^t d_b^m d_{b'}^m d_a^r \sum_{\mathcal{P}\mathcal{P}'}(-1)^{\mathcal{P}+\mathcal{P}'}(-1)^{J_f+J_m+M_f+M_m+m_c^t+m_{b'}^m-1} \times \frac{\begin{pmatrix} j_c^t & L_2 & j^m \\ -m_c^t & M_2 & m_b^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_1 & m_a^r \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} S_{t,r}^{j^m}(2,1)\right]$$

[1] La seule différence est que dans notre cas E_m et E_i sont les énergies totales des états atomiques intermédiaire et initial !

Termes non-croisés

Nous avons :

$$S^{J_m}_{t,r}(2,1)S^{J_m}_{t',r'}(2,1) = (2j^m+1)$$

$$\times\left[\sum_{c,b,b',a} d^t_c d^m_b d^m_{b'} d^r_a \sum_{\mathcal{P}_m\mathcal{P}_i}(-1)^{\mathcal{P}_m+\mathcal{P}_i}(-1)^{J_f+J_m+M_f+M_m+m^f_c+m^m_{b'}-1}\frac{\begin{pmatrix} j^t_c & L_2 & j^m \\ -m^t_c & M_2 & m^m_b\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j^r_a \\ -m^m_{b'} & M_1 & m^r_a\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i\end{pmatrix}}\right]$$

$$\times\left[\sum_{c',e,e',a'} d^{t'}_{c'} d^m_e d^m_{e'} d^{r'}_{a'} \sum_{\mathcal{P}_m\mathcal{P}'_i}(-1)^{\mathcal{P}_m+\mathcal{P}'_i}(-1)^{J_f+J_m+M_f+M_m+m^{t'}_{c'}+m^m_{e'}-1}\frac{\begin{pmatrix} j^{t'}_{c'} & L_2 & j^m \\ -m^{t'}_{c'} & M_2 & m^m_e\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j^{r'}_{a'} \\ -m^m_{e'} & M_1 & m^{r'}_{a'}\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i\end{pmatrix}}\right]$$

$$\times\left[S^{j^m}_{t,r}(2,1)\times S^{j^m}_{t',r'}(2,1)\right]$$

mais $(-1)^{2(J_f+M_f)+2(J_m+M_m)+2(\mathcal{P}_m-1)} = 1$, soit :

$$S^{J_m}_{t,r}(2,1)S^{J_m}_{t',r'}(2,1) = (2j^m+1)\sum_{c,b,b',a} d^t_c d^m_b d^m_{b'} d^r_a \sum_{c',e,e',a'} d^{t'}_{c'} d^m_e d^m_{e'} d^{r'}_{a'} \sum_{\mathcal{P}_i\mathcal{P}'_i}(-1)^{\mathcal{P}_i+\mathcal{P}'_i}(-1)^{m^{t'}_{c'}+m^t_c+m^m_{b'}+m^m_{e'}}$$

$$\times\left[\frac{\begin{pmatrix} j^t_c & L_2 & j^m \\ -m^t_c & M_2 & m^m_b\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j^r_a \\ -m^m_{b'} & M_1 & m^r_a\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^{t'}_{c'} & L_2 & j^m \\ -m^{t'}_{c'} & M_2 & m^m_e\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j^{r'}_{a'} \\ -m^m_{e'} & M_1 & m^{r'}_{a'}\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i\end{pmatrix}}\right]$$

$$\times\left[S^{j^m}_{t,r}(2,1)\times S^{j^m}_{t',r'}(2,1)\right]$$

et :

$$S^{J_m}_{t,r}(1,2)S^{J_m}_{t',r'}(1,2) = (2j^m+1)\sum_{c,b,b',a} d^t_c d^m_b d^m_{b'} d^r_a \sum_{c',e,e',a'} d^{t'}_{c'} d^m_e d^m_{e'} d^{r'}_{a'} \sum_{\mathcal{P}_i\mathcal{P}'_i}(-1)^{\mathcal{P}_i+\mathcal{P}'_i}(-1)^{m^{t'}_{c'}+m^t_c+m^m_{b'}+m^m_{e'}}$$

$$\times\left[\frac{\begin{pmatrix} j^t_c & L_1 & j^m \\ -m^t_c & M_1 & m^m_b\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_m \\ -M_f & M_1 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_2 & j^r_a \\ -m^m_{b'} & M_2 & m^r_a\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_2 & J_i \\ -M_m & M_2 & M_i\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^{t'}_{c'} & L_1 & j^m \\ -m^{t'}_{c'} & M_1 & m^m_e\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_m \\ -M_f & M_1 & M_m\end{pmatrix}}\frac{\begin{pmatrix} j^m & L_2 & j^{r'}_{a'} \\ -m^m_{e'} & M_2 & m^{r'}_{a'}\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_2 & J_i \\ -M_m & M_2 & M_i\end{pmatrix}}\right]$$

$$\times\left[S^{j^m}_{t,r}(1,2)\times S^{j^m}_{t',r'}(1,2)\right]$$

Termes croisés

Nous avons :

$$S_{t,r}^{J_m}(2,1)S_{t',r'}^{J'_m}(1,2) = \sqrt{(2j^m+1)}\sqrt{(2j^{m'}+1)}\sum_{c,b,b',a} d_c^t d_b^m d_{b'}^m d_a^r \sum_{c',e,e',a'} d_{c'}^{t'} d_e^{m'} d_{e'}^{m'} d_{a'}^{r'}$$

$$\times \sum_{\mathcal{P}_m \mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_i \mathcal{P'}_i} (-1)^{\mathcal{P}_m+\mathcal{P}_i+\mathcal{P}_{m'}+\mathcal{P'}_i}(-1)^{m_{c'}^{t'}+m_c^t+m_{b'}^m+m_{e'}^{m'}}$$

$$\times \left[\frac{\begin{pmatrix} j_c^t & L_2 & j^m \\ -m_c^t & M_2 & m_b^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_1 & m_a^r \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j_{c'}^{t'} & L_1 & j^{m'} \\ -m_{c'}^{t'} & M_1 & m_e^{m'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_{m'} \\ -M_f & M_1 & M_{m'} \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^{m'} & L_2 & j_{a'}^{r'} \\ -m_{e'}^{m'} & M_2 & m_{a'}^{r'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_{m'} & L_2 & J_i \\ -M_{m'} & M_2 & M_i \end{pmatrix}} \right]$$

$$\times \left[S_{t,r}^{j^m}(2,1)S_{t',r'}^{j^{m'}}(1,2) \right]$$

6.2.3 Expression finale pour $\mathbf{L_1}$ et $\mathbf{L_2}$ fixés

En rassemblant les termes précédents, nous obtenons :

$$
\begin{aligned}
\frac{d\bar{W}}{d\omega_1} = \frac{\omega_1\omega_2}{(2\pi)^3 c^2 (2J_i+1)} \sum_{t,r,t',r'} c_t c_r c_{t'} c_{r'} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 J_m} \frac{2j^m+1}{2J_m+1} \\
\times \Bigg\{ \Bigg(\sum_{c,b,b',a} d_c^t d_b^m d_{b'}^m d_a^r \sum_{c',e,e',a'} d_{c'}^{t'} d_e^m d_{e'}^m d_{a'}^{r'} \sum_{\mathcal{P}_i \mathcal{P}'_i} (-1)^{\mathcal{P}_i + \mathcal{P}'_i} (-1)^{m_{c'}^{t'} + m_c^t + m_{b'}^m + m_{e'}^m} \\
\times \left[\frac{\begin{pmatrix} j_c^t & L_2 & j^m \\ -m_c^t & M_2 & m_b^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_1 & m_a^r \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j_{c'}^{t'} & L_2 & j^m \\ -m_{c'}^{t'} & M_2 & m_e^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_{a'}^{r'} \\ -m_{e'}^m & M_1 & m_{a'}^{r'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} \right] \\
\times \left[S_{t,r}^{j^m}(2,1) \times S_{t',r'}^{j^m}(2,1) \right] \\
+ \left[\frac{\begin{pmatrix} j_c^t & L_1 & j^m \\ -m_c^t & M_1 & m_b^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_m \\ -M_f & M_1 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_2 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_2 & m_a^r \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_2 & J_i \\ -M_m & M_2 & M_i \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j_{c'}^{t'} & L_1 & j^m \\ -m_{c'}^{t'} & M_1 & m_e^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_m \\ -M_f & M_1 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_2 & j_{a'}^{r'} \\ -m_{e'}^m & M_2 & m_{a'}^{r'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_2 & J_i \\ -M_m & M_2 & M_i \end{pmatrix}} \right] \\
\times \left[S_{t,r}^{j^m}(1,2) \times S_{t',r'}^{j^m}(1,2) \right] \Bigg) \\
+2 \times \sqrt{\frac{2j^{m'}+1}{2j^m+1}} (2J_m+1) \sum_{J_{m'}} (-1)^{J_m + J_{m'} + L_1 + L_2} \begin{Bmatrix} J_f & J_{m'} & L_1 \\ J_i & J_m & L_2 \end{Bmatrix} \\
\times \sum_{c,b,b',a} d_c^t d_b^m d_{b'}^m d_a^r \sum_{c',e,e',a'} d_{c'}^{t'} d_e^{m'} d_{e'}^{m'} d_{a'}^{r'} \times \sum_{\mathcal{P}_m \mathcal{P}_{m'} \mathcal{P}_i \mathcal{P}'_i} (-1)^{\mathcal{P}_m + \mathcal{P}_i + \mathcal{P}_{m'} + \mathcal{P}'_i} (-1)^{m_{c'}^{t'} + m_c^t + m_{b'}^m + m_{e'}^{m'}} \\
\times \left[\frac{\begin{pmatrix} j_c^t & L_2 & j^m \\ -m_c^t & M_2 & m_b^m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_m \\ -M_f & M_2 & M_m \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^m & L_1 & j_a^r \\ -m_{b'}^m & M_1 & m_a^r \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_m & L_1 & J_i \\ -M_m & M_1 & M_i \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j_{c'}^{t'} & L_1 & j^{m'} \\ -m_{c'}^{t'} & M_1 & m_e^{m'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_f & L_1 & J_{m'} \\ -M_f & M_1 & M_{m'} \end{pmatrix}} \frac{\begin{pmatrix} j^{m'} & L_2 & j_{a'}^{r'} \\ -m_{e'}^{m'} & M_2 & m_{a'}^{r'} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J_{m'} & L_2 & J_i \\ -M_{m'} & M_2 & M_i \end{pmatrix}} \right] \\
\times S_{t,r}^{j^m}(2,1) S_{t',r'}^{j^{m'}}(1,2) \Bigg\}
\end{aligned}
$$

où λ_1 et λ_2 sont les polarisations des deux photons. Nous rappellons que les états intermédiaires utilisés sont des fonctions d'état de configuration (CSF).

6.2.4 Conclusion

La formule précédente est valable pour les transitions à deux photons dans les systèmes à N-électrons et ceci quelque soit la combinaison de multipôles

considérée. Son insération dans le programme MDFGME est en cours.

6.3 Expression mathématique du taux de désintégration spontanée relativiste dans les systèmes héliumoïdes

6.3.1 Introduction

Comme nous l'avons dit dans l'introduction, la mise au point de la formule générale nous a amenés à trouver une généralisation au cas des systèmes à 2 électrons. Celle-ci est basée sur l'utilisation de l'algèbre de Racah. Cependant, comme nous l'avons signalé dans le troisième chapitre, le programme MDFGME repose sur l'utilisation des déterminants et de leurs combinaisons linéaires appelées fonctions d'états de configuration. De plus, dans le cas d'un calcul multiconfiguré aux poids d_i des déterminants présents dans une C.S.F., s'ajoute les coefficients c_ν de mélange des différentes configurations considérées. Devant une telle situation, il est difficile de faire cohabiter les poids des différents déterminants ainsi que les coefficients issus de l'utilisation de l'algèbre de Racah. Comme nous l'avons vu dans la section précédente, nous avons donc dû nous orienter vers une autre approche pour obtenir l'expression générale à N-électrons. Toutefois, l'expression ainsi obtenue peut être utilisée avec profit par d'autres programme faisant appel aux techniques de l'algèbre de Racah pour la construction des états atomiques.

6.3.2 L'article

Résumé :

Nous avons obtenu une expression théorique du taux d'émission à 2 photons des systèmes à deux électrons sous une forme adaptée à une insération facile dans les calculs numériques. Les techniques de l'algèbre de Racah ont été utilisées afin de généraliser le travail précédent sur l'émission à deux photons dans les systèmes hydrogénoïdes à des cas plus compliqués. L'expression obtenue est, autant que nous le sachions, la première expression générale qui donne le taux de désintégration spontanée à 2 photons dans les systèmes héliumoïdes et ce pour toutes les combinaisons de multipôles.

Chapitre 7

Atomes Exotiques

7.1 Détermination de la masse du pion chargé et de standards de calibration en énergie basés sur les transitions X des atomes pioniques

7.1.1 Introduction

En raison de l'absence de standards de calibration pour les rayons X de quelques keV, la détermination des énergies avec une précision de l'ordre du ppm est difficile [122]. De nombreux domaines des sciences actuelles ont besoin de tels standards, ceux existants faisant référence à des mesures vieilles de 40 ans ou étant dans certains cas le résultat d'une interpolation à partir d'éléments voisins. Pour ces raisons, une redétermination de ces standards est en cours avec différentes méthodes.

L'équipe expérimentale a décidé de profiter des récents développements dans le domaine des atomes exotiques et en particulier des raies X fines émises par les atomes pioniques hydrogénoïdes qui peuvent servir de standards en énergie dans le domaine d'énergie de quelques keV.

Aprés avoir rappelé le principe de l'expérience actuellement en cours à l'institut Paul Scherrer, nous présenterons les calculs effectués par l'équipe théorique. Notre équipe s'est interessée à la détermination de la masse du pion.

7.1.2 Expérience

Dispositif

L'expérience s'est déroulée sur la ligne πE5 de l'Institut Paul Scherrer (PSI). Pour obtenir des valeurs précises des énergies des rayons X, les expérimentateurs ont utilisé un spectromètre à réflexion de Bragg [123] consistant en un grand cristal de Si(220) de forme sphérique couplé avec des détecteurs CCD (Charge-Coupled Device). Ainsi, les rayons X issus de transitions venant sur le cristal sont réfléchis vers les détecteurs CCD selon la loi de Bragg :

$$n\lambda = 2d \sin\theta_B, \tag{7.1}$$

où n est l'ordre de réflexion et θ_B l'angle des rayons X incidents par rapport aux plans du cristal (Angle de Bragg), auquel les rayons réfléchis interfèrent de manière constructive. Les énergies sont obtenues à partir du changement de l'angle de Bragg relatif à une transition de calibration se trouvant le plus près possible de la raie étudiée.

Les atomes pioniques sont produits en arrêtant un faisceau de π^- dans une cible où ils sont capturés par le potentiel des atomes dans des états de haut n. Ces systèmes se désexcitent au début de la cascade par des émissions Auger rapides puis de plus en plus par rayonnement de rayons X.

Ces dernières années, des études ont montré que des systèmes de bas et moyen Z deviennent hydrogénoïdes, c'est-à-dire que tous les électrons sont éjectés lorsque la cible est préparée dans de bonnes conditions. Des cibles gazeuses sont particulièrement bien adaptées à la différence des cibles solides où la population électronique est mal connue.

Dans le domaine $Z \approx 2-10$, il y a une fenêtre où les électrons des atomes pioniques et muoniques sont complètement éjectés et les énergies de transition deviennent accessibles par spectroscopie X. Pour les états atomiques de moment angulaire maximal $l = n - 1$, les effets de taille finie peuvent être négligés. De plus, dans le ca d'atomes pioniques,les niveaux d'énergie ne subissent pas de déplacements causés par l'interaction forte. Donc,les énergies de liaisons peuvent être calculées avec une précision de 1 ppm ou plus en incluant toutes les corrections importantes de QED. Nous reviendrons sur ces corrections et sur la différence existante entre les atomes ordinaires et les atomes exotiques. Dans de tels systèmes hydogénoides, le centre de gravité d'une transition peut être déterminé avec une précision de 10^{-6}.

Principe

Lorsque cela est possible, il consiste à trouver une transition dans l'atome exotique qui soit proche de celle que l'on désire étudier. En utilisant cette méthode, la limitation provient de l'incertitude sur la masse du pion. Un autre programme est actuellement consacré à une détermination de la masse du pion avec une précision de 1 ppm. Une autre possibilité est d'utiliser des atomes muoniques car la masse du muon est connue avec une précision de 0.05 ppm. Cependant, les intensités obtenues sont dans ce cas de deux ordres de grandeur plus petits que ceux obtenus dans les atomes pioniques. Il n'est possible d'obtenir une précision de $1ppm$ sur la masse du pion π^- qu'avec un système de diffraction utilisant des cristaux. Pour cela, afin de mesurer la masse du pion sans rencontrer les problèmes qui se produisent avec une cible solide de magnésium ([124],[125]), la cible utilisée est constituée d'un mélange gazeux de O^{16} et de N^{14}. La première composante de ce mélange gazeux (0^{16}) permet la création d'oxygène muonique $\mu 0$ qui est utilisé pour la calibration de l'appareil ; quant à la seconde composante (N^{14}), elle permet la création de nitrogène pionique πN. La pression est basse afin de limiter le processus de recapture. Nous renvoyons le lecteur désireux de connaître les détails de l'expérience aux références suivantes : ([126], [127] et [128]).

7.1.3 Interaction pion-électron : Terme de Breit

Introduction

Afin d'établir des standards de calibration en énergie pour les rayons X en utilisant des atomes pioniques, il nous a semblé intéressant de calculer la contribution à l'énergie d'un niveau provenant de l'interaction entre un électron et un pion due à l'échange d'un photon transverse. En effet et uniquement dans le cas de Z bas ou moyen, comme nous l'avons signalé dans la section précédente, nous sommes quasiment certains que tous les électrons ont été ejectés et n'ont pas eu le temps d'être recapturés durant la durée de vie de l'atome exotique[1].

En revanche, ce n'est pas le cas si la cible utilisée est dense ou si les atomes utilisés dans une cible gazeuse ont un Z élevé. Afin d'obtenir des valeurs théoriques précises, il est donc nécessaire de tenir compte de l'interaction entre le pion et les électrons résiduels. Nous avons donc établi une expression équivalente au terme de Breit de l'interaction électron-électron. La complication dans le cas pion-électron provient de la présence d'opérateurs

[1] Moins de 2% des rayons X observés dans ce cas sont affectés par la présence d'électrons résiduels.

∂_μ dans l'expression du courant pionique.

Opérateurs de champs, déplacement énergétique et opérateurs de courants

Opérateurs du champ électronique

Les opérateurs [2] du champ électro-positronique $\hat{\Psi}(x)$ sont développés en fonction des opérateurs d'annihilation (création) d'électrons $\hat{a}_n$ ($\hat{a}_n^+$) et des opérateurs de création (annihilation) de positrons $\hat{b}_n^+$ ($\hat{b}_n$), soit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{\Psi}(x) = & \sum_{E_n>0} \hat{a}_n \phi_n(x) + \sum_{E_n<0} \hat{b}_n^+ \phi_n(x) \\ \hat{\bar{\Psi}}(x) = & \sum_{E_n>0} \hat{a}_n^+ \bar{\phi}_n(x) + \sum_{E_n<0} \hat{b}_n \bar{\phi}_n(x) \end{array} \right. \tag{7.2}$$

Les $\phi_n(x)$ sont les solutions de l'équation de Dirac incluant le potentiel Coulombien du noyau, c'est-à-dire :

$$\phi_n(x) = \phi_n(\vec{x}) \exp(-iE_n t) \quad \text{où} \quad \phi_n(\vec{x}) = \psi_{n\kappa jm}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} f_{n\kappa}(x)\mathcal{Y}_{\kappa jm}(\theta,\varphi) \\ ig_{n\kappa}(x)\mathcal{Y}_{-\kappa jm}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

avec :

$$\mathcal{Y}_{\kappa jm}(\theta,\varphi) = \begin{pmatrix} -\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{l},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \tag{7.4}$$

L'indice n représente l'ensemble complet des nombres quantiques $\{n, l, j, m\}$ nécessaires pour définir un état ; n est le nombre quantique principal, l détermine la parité de l'état $P = (-1)^l$, j est le moment cinétique total et m sa projection sur l'axe z. Les relations d'anticommutation entre les opérateurs de création et d'annihilation sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \{\hat{a}_n, \hat{a}_{n'}^+\} = \delta_{nn'}^+ \\ \{\hat{b}_n, \hat{b}_{n'}^+\} = \delta_{nn'}^- \end{array} \right. \tag{7.5}$$

avec :

$$\delta_{nn'}^{\pm} = \theta(\pm E_n)\delta_{nn'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}, \tag{7.6}$$

si n et n' sont dans le spectre discret.

Opérateurs du champ pionique

Les opérateurs du champ pionique $\hat{\Phi}(x)$ sont développés en fonction des opérateurs d'annihilation (création) de π^+ $\hat{c}_n$ ($\hat{c}_n^+$) et des opérateurs de création (annihilation) de pions π^- $\hat{d}_n^+$ ($\hat{d}_n$), soit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{\Phi}(x) = & \sum_{E_n>0} \hat{c}_n \zeta_n(x) + \sum_{E_n<0} \hat{d}_n^+ \zeta_n(x) \\ \hat{\Phi}^+(x) = & \sum_{E_n>0} \hat{c}_n^+ \zeta_n^*(x) + \sum_{E_n<0} \hat{d}_n \zeta_n^*(x) \end{array} \right. \tag{7.7}$$

[2] Les lettres grecques représentant des opérateurs sont surmontées d'un chapeau.

Les $\phi_n(x)$ sont les fonctions d'onde liées dans l'espace des coordonnées, soit :

$$\phi_n(x) = u_n(\vec{x}) \exp(-iE_n t), \tag{7.8}$$

$u_n(\vec{x})$ est une solution de l'équation de Klein-Gordon indépendante du temps :

$$\left[\partial^2 - m_\pi^2 + (V(\vec{x}) - E_n)^2\right] = 0, \tag{7.9}$$

dans laquelle :

$$V(\vec{x}) = -\frac{Z\alpha}{|\vec{x}|} \tag{7.10}$$

Celle-ci est normalisée de façon à ce que le volume de quantification contienne la charge $-e$.

L'indice n représente l'ensemble complet des nombres quantiques $\{n, l, m\}$ nécessaires pour définir un état ; n est le nombre quantique principal, l le moment orbital total et m sa projection sur l'axe z. Les relations decommutation entre les opérateurs de création et d'annihilation sont :

$$[\hat{c}_n, \hat{c}_{n'}^+] = \delta_{nn'}^+ \quad \text{et} \quad [\hat{d}_n, \hat{d}_{n'}^+] = \delta_{nn'}^- \tag{7.11}$$

avec :

$$\delta_{nn'}^\pm = \theta(\pm E_n)\delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{7.12}$$

si n et n' sont dans le spectre discret. Tous les autres commutateurs sont nuls.

Dans le cas qui nous intéresse, il n'y a pas de positron e^+ ni de pion π^+ présents, d'où :

$$\begin{cases} \hat{\Psi}(x) = \sum_{E_n>0} \hat{a}_n \phi_n(x) \\ \hat{\bar{\Psi}}(x) = \sum_{E_n>0} \hat{a}_n^+ \bar{\phi}_n(x) \end{cases} \tag{7.13}$$

et :

$$\begin{cases} \hat{\Phi}(x) = \sum_{E_n<0} \hat{d}_n^+ \zeta_n(x) \\ \hat{\Phi}^+(x) = \sum_{E_n<0} \hat{d}_n \zeta_n^*(x) \end{cases} \tag{7.14}$$

Le théorème de Gell-Mann et Low (sous sa forme symétrisée par Sucher) est utilisé pour obtenir une expression du déplacement en énergie d'un état pionique lié dans le cadre de la théorie des perturbations :

$$\Delta E_n = \lim_{\substack{\lambda \to 1 \\ \varepsilon \to 0}} \frac{1}{2} i\varepsilon \frac{\partial \langle n| S_{\varepsilon,\lambda} |n\rangle / \partial\lambda}{\langle n| S_{\varepsilon,\lambda} |n\rangle} = \lim_{\substack{\lambda \to 1 \\ \varepsilon \to 0}} \frac{1}{2} i\varepsilon \frac{\partial \langle n| S_{\varepsilon,\lambda} |n\rangle_c / \partial\lambda}{\langle n| S_{\varepsilon,\lambda} |n\rangle_c} \tag{7.15}$$

L'indice c rappelle le fait que seuls les diagrammes de Feynman connectés sont inclus dans les éléments de matrice. Dans l'expression précédente, $S_{\varepsilon,\lambda}$ est la Matrice S adiabatique définie par :

$$\begin{cases} S_{\varepsilon,\lambda} = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} S_{\varepsilon,\lambda}^{(j)} \\ \quad \text{avec} \\ S_{\varepsilon,\lambda}^{(j)} = \frac{(-i\lambda)^j}{j!} \int d^4x_j \cdots \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_j|} \cdots e^{-\varepsilon|t_1|} T[\hat{\mathcal{H}}_I(x_j) \cdots \hat{\mathcal{H}}_I(x_1)], \end{cases} \tag{7.16}$$

où $\hat{\mathcal{H}}_I(x)$ est la densité d'hamiltonien d'interaction définie par :

$$\hat{\mathcal{H}}_I(x) = \hat{j}^{\mu}(x)\hat{A}_{\mu}(x) - \delta\hat{M}(x) \tag{7.17}$$

On a :

$$|n\rangle = \left| k^{\pi^-}; l^{e^-}; 0^{\gamma} \right\rangle \tag{7.18}$$

La correction due à l'échange d'un photon virtuel (ordre α)

On a :

$$E^{(2)} = \lim_{\substack{\lambda \to 1 \\ \varepsilon \to 0}} \frac{1}{2} i\varepsilon \left[\left\langle S_{\varepsilon}^{(1)} \right\rangle_c + 2 \left\langle S_{\varepsilon}^{(2)} \right\rangle_c \right] \tag{7.19}$$

La correction d'ordre α due à l'échange d'un photon virtuel entre un pion et un électron vient du terme $\left\langle S_{\varepsilon}^{(2)} \right\rangle$ qui, après utilisation du théorème de Wick, ne contient aucune contraction de champs électroniques ou positroniques. On a donc :

$$\left\langle S_{\varepsilon}^{(2)} \right\rangle_c = \frac{(-i)^2}{2!} \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \left\langle T[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2)\hat{A}_{\mu_2}(x_2)\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1)\hat{A}_{\mu_1}(x_1)] \right\rangle_c$$

$$\begin{aligned} &= \tfrac{(-i)^2}{2!} \textstyle\int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \langle k; l; 0^{\gamma}| \, T[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2)\hat{A}_{\mu_2}(x_2)\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1)\hat{A}_{\mu_1}(x_1)] \, |k; l; 0^{\gamma}\rangle_c \\ &= \tfrac{(-i)^2}{2!} \textstyle\int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \langle k| \, T[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2) \, |k\rangle_c \langle l| \, T[\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1) \, |l\rangle_c \langle 0^{\gamma}| \, T[\hat{A}_{\mu_2}(x_2)\hat{A}_{\mu_1}(x_1)] \, |0^{\gamma}\rangle_c \\ &= \tfrac{(-i)^2}{2!} \textstyle\int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \langle k| \, T[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2) \, |k\rangle_c \langle l| \, T[\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1) \, |l\rangle_c \, g_{\mu_2\mu_1} D_F(x_2 - x_1) \end{aligned}$$

soit :

$$\left\langle S_{\varepsilon}^{(2)} \right\rangle_c = \frac{-1}{2!} \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \langle k| \, N[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2) \, |k\rangle_c \langle l| \, N[\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1) \, |l\rangle_c \, g_{\mu_2\mu_1} D_F(x_2 - x_1)$$

Le facteur $\frac{1}{n!}$ issu de la série de Taylor est toujours annulé par les $n!$ façons différentes d'interchanger les vertex. On a donc :

$$\left\langle S_{\varepsilon}^{(2)} \right\rangle_c = -\int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \langle k| \, N[\hat{j}_{\pi^-}^{\mu_2}(x_2) \, |k\rangle_c \langle l| \, N[\hat{j}_{e^-}^{\mu_1}(x_1) \, |l\rangle_c \, g_{\mu_2\mu_1} D_F(x_2 - x_1) \tag{7.20}$$

Courant électronique

$$\hat{j}^{\mu}_{e^-}(x) = -e\hat{\bar{\psi}}(x)\gamma^{\mu}\hat{\psi}(x)$$

soit :

$$N\left[\hat{j}^{\mu_1}_{e^-}(x_1)\right] = -e\sum_{E_{k'}>0}\sum_{E_{l'}>0}\hat{a}^{+}_{k'}\hat{a}_{l'}\bar{\phi}_{k'}(x_1)\gamma^{\mu_1}\phi_{l'}(x_1) \tag{7.21}$$

Courant pionique

$$\hat{j}^{\mu}_{\pi^-}(x) = -ie\left[\hat{\Phi}^{+}\partial^{\mu}\hat{\Phi} - \hat{\Phi}\partial^{\mu}\hat{\Phi}^{+}\right]$$

avec :

$$\left\{\begin{array}{c} \hat{\Phi}(x) = \sum_{E_{n'}<0}\hat{d}^{+}_{n'}\zeta_{n'}(x) \\ \hat{\Phi}^{+}(x) = \sum_{E_{m'}<0}\hat{d}_{m'}\zeta^{*}_{m'}(x) \end{array}\right. \tag{7.22}$$

d'où :

$$\begin{aligned} N\left[\hat{j}^{\mu}_{\pi^-}(x_2)\right] &= -ieN\left[\left(\sum_{E_{m'}<0}\hat{d}_{m'}\zeta^{*}_{m'}(x_2)\right)\partial^{\mu}\left(\sum_{E_{n'}<0}\hat{d}^{\dagger}_{n'}\zeta_{n'}(x_2)\right)\right. \\ &\quad \left. -\left(\sum_{E_{n'}<0}\hat{d}^{\dagger}_{n'}\zeta_{n'}(x_2)\right)\partial^{\mu}\left(\sum_{E_{m'}<0}\hat{d}_{m'}\zeta^{*}_{m'}(x_2)\right)\right] \\ &= -e\sum_{E_{n'}<0}\sum_{E_{m'}<0}\hat{d}^{\dagger}_{n'}\hat{d}_{m'}\left[\zeta^{*}_{m'}(x_2)i\partial^{\mu}\left(\zeta_{n'}(x_2)\right) - \zeta_{n'}(x_2)i\partial^{\mu}\left(\zeta^{*}_{m'}(x_2)\right)\right] \end{aligned}$$

avec :

$$\left\{\begin{array}{l} \zeta_n(x) = u_n(\mathbf{x})e^{-iE_n t} \text{ où } u_n(\mathbf{x}) = u_{nlm}(\mathbf{x}) = u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \\ \zeta^{*}_n(x) = u^{*}_n(\mathbf{x})e^{+iE_n t} \text{ où } u^{*}_n(\mathbf{x}) = u^{*}_{nlm}(\mathbf{x}) = u_{nl}(r)Y^{*}_{lm}(\theta,\phi) \\ i\partial^{\mu} = \{i\partial_t, -i\nabla\} \end{array}\right.$$

Calcul de $\mathbf{E^{(2)}_{PE}}$

On a donc :

$$\left\langle S^{(2;PE)}_{\varepsilon}\right\rangle_c = -\int d^4x_2\int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|}e^{-\varepsilon|t_1|}\left\langle k\left|\mathbf{N}\left[\hat{j}^{\mu_2}_{\pi^-}(x_2)\right]\right|k\right\rangle_c\left\langle l\left|\mathbf{N}\left[\hat{j}^{\mu_1}_{e^-}(x_1)\right]\right|l\right\rangle_c \times g_{\mu_2\mu_1}D_F(x_2-x_1)$$

soit :

$$\begin{aligned}
\left\langle S_{\varepsilon}^{(2;PE)} \right\rangle_c &= -e^2 \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} \\
&\times \left\langle k \left| \sum_{E_{n'}<0} \sum_{E_{m'}<0} \hat{d}^{\dagger}_{n'} \hat{d}_{m'} \left[\zeta^*_{m'}(x_2) i\partial^{\mu_2} \left(\zeta_{n'}(x_2) \right) - \zeta_{n'}(x_2) i\partial^{\mu_2} \left(\zeta^*_{m'}(x_2) \right) \right] \right| k \right\rangle_c \\
&\times \left\langle l \left| \sum_{E_{k'}>0} \sum_{E_{l'}>0} \hat{a}^{\dagger}_{k'} \hat{a}_{l'} \bar{\phi}_{k'}(x_1) \gamma^{\mu_1} \phi_{l'}(x_1) \right| l \right\rangle_c g_{\mu_2\mu_1} D_F(x_2 - x_1)
\end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
\left\langle S_{\varepsilon}^{(2;PE)} \right\rangle_c &= -e^2 \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} g_{\mu_2\mu_1} D_F(x_2 - x_1) \\
&\times \sum_{E_{n'}<0} \sum_{E_{m'}<0} \left[\zeta^*_{m'}(x_2) i\partial^{\mu_2} \left(\zeta_{n'}(x_2) \right) - \zeta_{n'}(x_2) i\partial^{\mu_2} \left(\zeta^*_{m'}(x_2) \right) \right] \left\langle k \left| \hat{d}^{\dagger}_{n'} \hat{d}_{m'} \right| k \right\rangle_c \\
&\times \sum_{E_{k'}>0} \sum_{E_{l'}>0} \bar{\phi}_{k'}(x_1) \gamma^{\mu_1} \phi_{l'}(x_1) \left\langle l \left| \hat{a}^{\dagger}_{k'} \hat{a}_{l'} \right| l \right\rangle_c
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle S_{\varepsilon}^{(2;PE)} \right\rangle_c &= -e^2 \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} D_F(x_2 - x_1) \\
&\times \sum_{E_{n'}<0} \sum_{E_{m'}<0} \left[\zeta^*_{m'}(x_2) i\partial_{\mu_1} \left(\zeta_{n'}(x_2) \right) - \zeta_{n'}(x_2) i\partial_{\mu_1} \left(\zeta^*_{m'}(x_2) \right) \right] \left\langle k \left| \hat{d}^{\dagger}_{n'} \hat{d}_{m'} \right| k \right\rangle_c \\
&\times \sum_{E_{k'}>0} \sum_{E_{l'}>0} \bar{\phi}_{k'}(x_1) \gamma^{\mu_1} \phi_{l'}(x_1) \left\langle l \left| \hat{a}^{\dagger}_{k'} \hat{a}_{l'} \right| l \right\rangle_c
\end{aligned}$$

soit :

$$\begin{aligned}
\left\langle S_{\varepsilon}^{(2;PE)} \right\rangle_c &= -e^2 \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} D_F(x_2 - x_1) \\
&\times \sum_{E_{n'}<0} \sum_{E_{m'}<0} \left[\zeta^*_{m'}(x_2) i\partial_{\mu} \left(\zeta_{n'}(x_2) \right) - \zeta_{n'}(x_2) i\partial_{\mu} \left(\zeta^*_{m'}(x_2) \right) \right] \left\langle k \left| \hat{d}^{\dagger}_{n'} \hat{d}_{m'} \right| k \right\rangle \\
&\times \sum_{E_{k'}>0} \sum_{E_{l'}>0} \phi^{+}_{k'}(x_1) \alpha^{\mu} \phi_{l'}(x_1) \left\langle l \left| \hat{a}^{\dagger}_{k'} \hat{a}_{l'} \right| l \right\rangle_c
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -e^2 \int d^4x_2 \int d^4x_1 e^{-\varepsilon|t_2|} e^{-\varepsilon|t_1|} D_F(x_2 - x_1) \\
&\times \sum_{E_{k'}>0} \sum_{E_{l'}>0} \sum_{E_{n'}<0} \sum_{E_{m'}<0} \phi^{+}_{k'}(x_1) \alpha^{\mu} \phi_{l'}(x_1) \left[\zeta^*_{m'}(x_2) i\partial_{\mu} \left(\zeta_{n'}(x_2) \right) - \zeta_{n'}(x_2) i\partial_{\mu} \left(\zeta^*_{m'}(x_2) \right) \right] \\
&\times \left\langle l \left| \hat{a}^{\dagger}_{k'} \hat{a}_{l'} \right| l \right\rangle \left\langle k \left| \hat{d}^{\dagger}_{n'} \hat{d}_{m'} \right| k \right\rangle
\end{aligned}$$

or :

$$D_F(x_2 - x_1) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(-\frac{e^{-bx_{21}}}{4\pi x_{21}}\right) e^{-iz(t_2-t_1)}$$

avec :

$$x_{21} = |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \text{ et } b = -i\sqrt{(z^2 + i\delta)} \text{ , } \Re b > 0$$

Pour ε petit, on peut simplifier l'intégration sur t_2 et t_1. Soit :

$$\begin{aligned}\left\langle S_\varepsilon^{(2;PE)}\right\rangle_c &= -e^2\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \int dt_2 \int dt_1 e^{-\varepsilon|t_2|}e^{-\varepsilon|t_1|}e^{-iz(t_2-t_1)} \\ &\times \sum_{E_{k'}>0}\sum_{E_{l'}>0}\sum_{E_{n'}<0}\sum_{E_{m'}<0} e^{-i(E_{l'}-E_{k'})t_1}e^{-i(E_{m'}-E_{n'})t_2} \\ \times \int d^3x_2 \int d^3x_1 &\left(-\frac{e^{-bx_{21}}}{4\pi x_{21}}\right)\phi_{k'}^+(\vec{x}_1)\alpha^\mu\phi_{l'}(\vec{x}_1)\left[\zeta_{m'}^*(\vec{x}_2)(-p^\mu)\left(\zeta_{n'}(\vec{x}_2)\right) - \zeta_{n'}(\vec{x}_2)(+p^\mu)\left(\zeta_{m'}^*(\vec{x}_2)\right)\right] \\ &\times \left\langle l\left|\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_{l'}\right|l\right\rangle\left\langle k\left|\hat{d}_{n'}^\dagger\hat{d}_{m'}\right|k\right\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left\langle S_\varepsilon^{(2;PE)}\right\rangle_c &= -e^2\frac{1}{2\pi i}\sum_{E_{k'}>0}\sum_{E_{l'}>0}\sum_{E_{n'}<0}\sum_{E_{m'}<0} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int dt_2 \int dt_1 e^{-\varepsilon(|t_2|+|t_1|)}e^{-iz(t_2-t_1)}e^{-i\triangle E_{l'k'}t_1}e^{-i\triangle E_{m'n'}t_2} \\ \times \int d^3x_2 \int d^3x_1 &\left(-\frac{e^{-bx_{21}}}{4\pi x_{21}}\right)\phi_{k'}^+(\vec{x}_1)\alpha^\mu\phi_{l'}(\vec{x}_1)\left[\zeta_{m'}^*(\vec{x}_2)(-p^\mu)\left(\zeta_{n'}(\vec{x}_2)\right) - \zeta_{n'}(\vec{x}_2)(+p^\mu)\left(\zeta_{m'}^*(\vec{x}_2)\right)\right] \\ &\times \left\langle l\left|\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_{l'}\right|l\right\rangle\left\langle k\left|\hat{d}_{n'}^\dagger\hat{d}_{m'}\right|k\right\rangle\end{aligned}$$

Utilisons la relation :

$$\begin{aligned}&\int dt_2 \int dt_1 e^{-\varepsilon(|t_2|+|t_1|)}e^{-iz(t_2-t_1)}e^{-i\triangle E_{l'k'}t_1}e^{-i\triangle E_{m'n'}t_2} \\ &= \delta\left(E_{k'} + E_{n'}, E_{l'} + E_{m'}\right)\frac{1}{\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} d\left(t_2 - t_1\right)e^{-iz(t_2-t_1)}e^{-i\triangle E_{l'k'}t_1}e^{-i\triangle E_{m'n'}t_2}\end{aligned}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}\left\langle S_\varepsilon^{(2;PE)}\right\rangle_c &= -e^2\sum_{E_{k'}>0}\sum_{E_{l'}>0}\sum_{E_{n'}<0}\sum_{E_{m'}<0}\int_{-\infty}^{+\infty} d\left(t_2 - t_1\right)\int d^3x_2 \int d^3x_1 D_F(x_2 - x_1) \\ &\times \phi_{k'}^+(x_1)\alpha^\mu\phi_{l'}(x_1)\left[\zeta_{m'}^*(x_2)i\partial_\mu\left(\zeta_{n'}(x_2)\right) - \zeta_{n'}(x_2)i\partial_\mu\left(\zeta_{m'}^*(x_2)\right)\right] \\ &\times \frac{1}{\varepsilon}\delta\left(E_{k'} + E_{n'}, E_{l'} + E_{m'}\right)\left\langle l\left|\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_{l'}\right|l\right\rangle_c\left\langle k\left|\hat{d}_{n'}^\dagger\hat{d}_{m'}\right|k\right\rangle\end{aligned}$$

Effectuons l'intégration sur $d\left(t_2-t_1\right)$ en utilisant le résultat (nous n'avons ici que le terme direct) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\left(t_2-t_1\right) D_F(x_2-x_1)=\frac{i}{4\pi x_{21}}$$

Dans nos unités $e^2=4\pi\alpha$, soit :

$$\begin{aligned}
E_{PE}^{(2)}=E_d=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2}i\varepsilon\left\langle 2S_\varepsilon^{(2;PE)}\right\rangle_c=\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1 \\
\times\left\{\phi_{k'}^+(x_1)\alpha^0\phi_{l'}(x_1)\left[\zeta_{m'}^*(x_2)i\partial_0\left(\zeta_{n'}(x_2)\right)-\zeta_{n'}(x_2)i\partial_0\left(\zeta_{m'}^*(x_2)\right)\right]\frac{1}{x_{21}}\right. \\
\times\delta\left(E_{k'}+E_{n'},E_{l'}+E_{m'}\right)\left\langle 0\left|\hat{a}_l\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_{l'}\hat{a}_l^\dagger\right|0\right\rangle\left\langle 0\left|\hat{d}_k\hat{d}_{n'}^\dagger\hat{d}_{m'}\hat{d}_k^\dagger\right|0\right\rangle \\
+\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_{k'}^+(x_1)(x_1)\vec{\alpha}\phi_{l'}(x_1)\left[\zeta_{m'}^*(x_2)i\vec{\nabla}\left(\zeta_{n'}(x_2)\right)-\zeta_{n'}(x_2)i\vec{\nabla}\left(\zeta_{m'}^*(x_2)\right)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
\left.\times\delta\left(E_{k'}+E_{n'},E_{l'}+E_{m'}\right)\left\langle 0\left|\hat{a}_k\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_{l'}\hat{a}_k^\dagger\right|0\right\rangle\left\langle 0\left|\hat{d}_l\hat{d}_{n'}^\dagger\hat{d}_{m'}\hat{d}_l^\dagger\right|0\right\rangle\right\}
\end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
E_{PE}^{(2)}=E_d=\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1 \\
\left\{\times\phi_{k'}^+(x_1)\alpha^0\phi_{l'}(x_1)\left[\zeta_{m'}^*(x_2)i\partial_0\left(\zeta_{n'}(x_2)\right)-\zeta_{n'}(x_2)i\partial_0\left(\zeta_{m'}^*(x_2)\right)\right]\frac{1}{x_{21}}\right. \\
\times\delta\left(E_{k'}+E_{n'},E_{l'}+E_{m'}\right)\delta_{k'k}\delta_{l'k}\delta_{n'l}\delta_{m'l} \\
+\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_{k'}^+(x_1)(x_1)\vec{\alpha}\phi_{l'}(x_1)i\left[\zeta_{m'}^*(x_2)\vec{\nabla}\left(\zeta_{n'}(x_2)\right)-\zeta_{n'}(x_2)\vec{\nabla}\left(\zeta_{m'}^*(x_2)\right)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
\left.\times\delta\left(E_{k'}+E_{n'},E_{l'}+E_{m'}\right)\delta_{k'k}\delta_{l'k}\delta_{n'l}\delta_{m'l}\right\}
\end{aligned}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
E_{PE}^{(2)}= \\
\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha^0\phi_k(x_1)\frac{e^2}{4\pi x_{21}}\left[\zeta_l^*(x_2)i\partial_0\left(\zeta_l(x_2)\right)-\zeta_l(x_2)i\partial_0\left(\zeta_l^*(x_2)\right)\right] \\
+\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\vec{\alpha}\phi_k(x_1)i\left[\zeta_l^*(x_2)\vec{\nabla}\left(\zeta_l(x_2)\right)-\zeta_l(x_2)\vec{\nabla}\left(\zeta_l^*(x_2)\right)\right]\frac{1}{x_{21}}
\end{aligned}$$

Le premier terme correspond donc à l'interaction coulombienne entre les deux distributions de charge.

Le second terme est :

$$\triangle E_d^B = \alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\vec{\alpha}\phi_k(x_1) i \left[u_l^*(x_2)\vec{\nabla}\left(u_l(x_2)\right) - u_l(x_2)\vec{\nabla}\left(u_l^*(x_2)\right)\right] \frac{1}{x_{21}}$$

Passons en représentation sphérique, on a alors :

$$\alpha_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_x + i\alpha_y\right) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_x + i\sigma_y\right) \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_x + i\sigma_y\right) & 0 \end{pmatrix} = -\frac{2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_0 = \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_x - i\alpha_y\right) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_x - i\sigma_y\right) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_x - i\sigma_y\right) & 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et [129] :

$$\begin{aligned} \nabla_{\pm 1}\left[u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\right] = & \sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{2(2l+1)(2l+3)}}\left(\frac{du_{nl}}{dr} - \frac{l}{r}u_{nl}\right)Y_{l+1m\pm 1}(\theta,\varphi) \\ & -\sqrt{\frac{(l\mp m-1)(l\mp m)}{2(2l-1)(2l+1)}}\left(\frac{du_{nl}}{dr} + \frac{l+1}{r}u_{nl}\right)Y_{l-1m\pm 1}(\theta,\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla_{0}\left[u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\right] = & \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\left(\frac{du_{nl}}{dr} - \frac{l}{r}u_{nl}\right)Y_{l+1m}(\theta,\varphi) \\ & +\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}\left(\frac{du_{nl}}{dr} + \frac{l+1}{r}u_{nl}\right)Y_{l-1m}(\theta,\varphi) \end{aligned}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \triangle E_d^B &= i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha\phi_k(x_1)u_l^*(x_2)\nabla\left(u_l(x_2)\right)\frac{1}{x_{21}} \\ & \quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha\phi_k(x_1)u_l(x_2)\nabla\left(u_l^*(x_2)\right)\frac{1}{x_{21}} \end{aligned}$$

soit :

$$\begin{aligned} \triangle E_d^B &= i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)u_l^*(x_2)\frac{\alpha_1.\nabla_2}{x_{21}}\phi_k(x_1)u_l(x_2) \\ & \quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)u_l(x_2)\frac{\alpha_1.\nabla_2}{x_{21}}\phi_k(x_1)u_l^*(x_2) \\ &= \triangle E_d^{B_1} + \triangle E_d^{B_2} \end{aligned}$$

Or, en représentation sphérique, on a :

$$\mathbf{A}.\mathbf{B} = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} A_{\mu} B_{-\mu}$$

Soit :

$$\alpha.\nabla = -\alpha_{+1}\nabla_{-1} + \alpha_0\nabla_0 - \alpha_{-1}\nabla_{+1}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
\triangle E_d^{B_1} &= i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) u_l^*(x_2) \frac{\alpha_1.\nabla_2}{x_{21}} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \\
&= i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) u_l^*(x_2) \frac{(-\alpha_{+1}\nabla_{-1} + \alpha_0\nabla_0 - \alpha_{-1}\nabla_{+1})}{x_{21}} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \\
&= -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) u_l^*(x_2) \frac{\alpha_{+1}\nabla_{-1}}{x_{21}} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \\
&\quad +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) u_l^*(x_2) \frac{\alpha_0\nabla_0}{x_{21}} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \\
&\quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) u_l^*(x_2) \frac{\alpha_{-1}\nabla_{+1}}{x_{21}} \phi_k(x_1) u_l(x_2)
\end{aligned}$$

soit :

$$\begin{aligned}
\triangle E_d^{B_1} &= -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{+1} \phi_k(x_1) u_l^*(x_2) \nabla_{-1} \left[u_l(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}} \\
&\quad +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_0 \phi_k(x_1) u_l^*(x_2) \nabla_0 \left[u_l(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}} \\
&\quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{-1} \phi_k(x_1) u_l^*(x_2) \nabla_{+1} \left[u_l(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}}
\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
\triangle E_d^{B_2} &= +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{+1} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_{-1} \left[u_l^*(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}} \\
&\quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_0 \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_0 \left[u_l^*(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}} \\
&\quad +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{-1} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_{+1} \left[u_l^*(x_2)\right] \frac{1}{x_{21}}
\end{aligned}$$

Intéressons-nous d'abord aux bispineurs, on a :

$$\phi_k(\vec{x}_1) = \begin{pmatrix} f_{n\kappa}(r_1)\mathcal{Y}_{\kappa jm}(\theta_1, \varphi_1) \\ ig_{n\kappa}(r_1)\mathcal{Y}_{-\kappa jm}(\theta_1, \varphi_1) \end{pmatrix}$$

avec $\kappa = \mathrm{sgn}\kappa\,|\kappa| = \mathrm{sgn}\kappa\left(\mathrm{j}+\frac{1}{2}\right)$, $l = j + \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}$ et $\bar{l} = j - \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}$.
Soit :

$$\phi_k(\mathbf{x}_1) = \begin{pmatrix} -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

et :

$$\phi_k^+(\mathbf{x}_1) = \Big(-f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),\quad f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),$$
$$-ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),\quad -ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Big)$$

d'où :

$$\alpha_{+1}\phi_k(x_1) = -\frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{+1}\phi_k(x_1) = -\frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ 0 \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ 0 \end{pmatrix}$$

et :

$$\alpha_0\phi_k(x_1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

$$\alpha_0\phi_k(x_1) = \begin{pmatrix} ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

et :

$$\alpha_{-1}\phi_k(x_1) = \frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{-1}\phi_k(x_1) = \frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ 0 \\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

On a donc :

$$\phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)$$

$$= \Big(f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1), \quad -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),$$
$$ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1), \quad ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \Big)$$

$$\times\frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ 0 \\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{2i\mathrm{sgn}\kappa}{\sqrt{2}}\Big[f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$+f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Big]$$

d'où :

$$\boxed{\begin{aligned} &\phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1) = 2i\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{\sqrt{2}} \\ &\times f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\Bigg[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa-m)^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ &+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa+m)^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg] \end{aligned}}$$

et :

$$\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)$$

$$= \Bigg(-f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1), \quad f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),$$

$$-ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1), \quad -ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \Bigg)$$

$$\times \begin{pmatrix} ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \end{pmatrix}$$

soit :

$$\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1) =$$

$$\Bigg[-i\left(\mathrm{sgn}\kappa\right)^2 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$-if_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$i\left(\mathrm{sgn}\kappa\right)^2 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$if_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]$$

$$= -i\Bigg[f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$+f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$-f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$

$$-f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]$$

D'où :

$$\boxed{\begin{aligned}&\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1) = -if_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\\&\Bigg[\sqrt{\frac{\left(m-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\&+\sqrt{\frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\&-\sqrt{\frac{\left(m-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\&-\sqrt{\frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]\end{aligned}}$$

Et pour finir :

$$\phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)$$

$$\begin{aligned}=\quad&\Bigg(\ f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\tfrac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),\quad -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\tfrac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1),\\&ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\tfrac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}^*_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\quad ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\tfrac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\ \Bigg)\\&\times-\frac{2}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\ ig_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\tfrac{-\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{-2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\0\\ -f_{n_k\kappa_k}(r_1)\mathrm{sgn}\kappa\sqrt{\tfrac{\kappa+\frac{1}{2}-\mathrm{m}}{2\kappa+1}}\mathrm{Y}_{\mathrm{j}+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},\mathrm{m}-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}=\quad&\frac{2i\mathrm{sgn}\kappa}{\sqrt{2}}\Bigg[f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}+m}{2\kappa+1}}\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}-m}{-2\kappa+1}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\&+f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\kappa+\frac{1}{2}-m}{2\kappa+1}}\sqrt{\frac{-\kappa+\frac{1}{2}+m}{-2\kappa+1}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]\end{aligned}$$

soit :

$$\boxed{\begin{aligned}&\phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1) = 2i\tfrac{\mathrm{sgn}\kappa}{\sqrt{2}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\Bigg[\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa+m)^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\\&+\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa-m)^2}{1-(2\kappa)^2}}Y_{j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]\end{aligned}}$$

En ce qui concerne le pion, on a :

$$\begin{aligned}\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l}(r_2)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\right] &= \sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)\,(l_l+m_l+2)}{2\,(2l_l+1)\,(2l_l+3)}}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)\\ &\quad -\sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)\,(l_l-m_l)}{2\,(2l_l-1)\,(2l_l+1)}}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)\end{aligned}$$

soit :

$$\boxed{\begin{array}{l} u_{n_l l_l}(r_2)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l}(r_2)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\right]= \\ \sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) \\ -\sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)\end{array}}$$

et :

$$\boxed{\begin{array}{l} u_{n_l l_l}(r_2)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\nabla_{0}\left[u_{n_l l_l}(r_2)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\right]= \\ \sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) \\ +\sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2)\end{array}}$$

et :

$$\boxed{\begin{array}{l} u_{n_l l_l}(r_2)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l}(r_2)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\right]= \\ \sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) \\ -\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)\end{array}}$$

Rappelons le théorème d'addition des harmoniques sphériques, soit :

$$\frac{1}{x_{21}}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\frac{4\pi}{2l+1}\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)$$

Calcul de $\triangle \mathbf{E}_{\mathbf{d}}^{\mathbf{B_1}}$

Celui-ci se compose de trois termes :

$$\boxed{\begin{array}{rl}\triangle E_d^{B_1}= & -i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\ & +i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_{0}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l}(x_2)\nabla_{0}\left[u_{n_l l_l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\ & -i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l}(x_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}\end{array}}$$

<u>Premier terme</u> :

On a :

$$-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}$$

$$= -i\alpha \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\frac{4\pi}{2l+1}\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\int d^3x_2\int d^3x_1$$
$$\times\frac{2i\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\right]$$
$$\times\left[\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)\right.$$
$$\left.-\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)\right]$$

On a donc :

$$2\alpha\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}\frac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)$$

$$\times\int d\Omega_1\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right]$$

$$\times\int\Omega_2\left[\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right.$$
$$\left.-\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right]$$

Or :

$$\int d\Omega Y_{l_1m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2m_2}(\theta,\varphi).Y_{l_3m_3}(\theta,\varphi)$$
$$= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}$$

et :

$$Y^*_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_{l-m}(\theta,\varphi)$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On obtient un résultat non nul si :

$$\boxed{\begin{cases} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=(2j_k+l) \text{ est pair,} \\ \text{or } 2j_k \text{ est toujours impair} \Rightarrow l \text{ doit être impair} \\ \text{et} \\ \text{si } m=+1. \end{cases}}$$

Pour :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}-m_k & m_k+\frac{1}{2} & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On obtient encore un résultat non nul si l est impair et $m=+1$. De plus, dans les deux cas précédents, on a :

$$\left|\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)-\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)\right| \leq l \leq 2j_k$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2j_k \text{ et impair}}$$

Pour le pion on a :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l -m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l+1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $m=+1$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l+1}$$

En ce qui concerne :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l -m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l-1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

De même, ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l-1 \\ m=+1 \end{cases}}$$

En rassemblant les résultats précédents, on trouve pour le premier terme :

$$
\begin{aligned}
&-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}}\\
&= \tfrac{2\alpha \mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\tfrac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2\\
&\times \tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\tfrac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times\left\{\left[(-1)^{m_k-\frac{1}{2}+1}\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -1\end{pmatrix}\right.\right.\\
&\left.+(-1)^{m_k-\frac{1}{2}+1}\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ \frac{1}{2}-m_k & m_k+\frac{1}{2} & -1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\sqrt{\tfrac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\tfrac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\tfrac{(2l_l+1)[2(l_l+1)+1](2l+1)}{4\pi}}\right.\\
&\times\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\\
&-\sqrt{\tfrac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\tfrac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\tfrac{(2l_l+1)[2(l_l-1)+1](2l+1)}{4\pi}}\\
&\left.\left.\times\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\right]\right\}
\end{aligned}
$$

soit pour le premier terme :

$$
\boxed{
\begin{aligned}
&-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}}\\
&= 2\alpha\tfrac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2 dr_1\int r_2^2 dr_2\tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\\
&\times\sqrt{\tfrac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\left\{(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right.\\
&\times\left[\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -1\end{pmatrix}+\right.\\
&\left.\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ \frac{1}{2}-m_k & m_k+\frac{1}{2} & -1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\tfrac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\tfrac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\right.\\
&\left.\left.-\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\tfrac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\tfrac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\right]\right\}
\end{aligned}
}
$$

<u>Deuxième terme :</u>

$$
i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \tfrac{1}{x_{21}} \\
&\Bigg[\sqrt{\tfrac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\
&+ \sqrt{\tfrac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\
&- \sqrt{\tfrac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \\
&- \sqrt{\tfrac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) \Bigg] \\
&\times \Bigg[\sqrt{\tfrac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \tfrac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) \\
&+ \sqrt{\tfrac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \tfrac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) \Bigg]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \alpha \textstyle\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \\
&\Bigg[\sqrt{\tfrac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
&+ \sqrt{\tfrac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
&- \sqrt{\tfrac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
&- \sqrt{\tfrac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \Bigg] \\
&\times \Bigg[\sqrt{\tfrac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \tfrac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \int d\Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
&+ \sqrt{\tfrac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \tfrac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \int d\Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \Bigg]
\end{aligned}
$$

1) On a donc :

$$
\begin{aligned}
&\int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \quad & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \quad & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Ce terme est non nul si :

$$\boxed{\begin{array}{l} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + l = 2j_k + l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m = 0 \end{array}}$$

2) On a :

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_1 Y_{j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k + \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y^*_{j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k + \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1, \varphi_1) \\ = \; & (-1)^{m_k + \frac{1}{2} + m} \int d\Omega_1 Y_{j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k + \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y_{j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, -m_k - \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1, \varphi_1) \\ = \; & (-1)^{m_k + \frac{1}{2} + m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right) + 1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right) + 1\right](2l+1)}{4\pi}} \\ & \times \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2} + m_k & -\frac{1}{2} - m_k & -m \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ce terme est non nul si :

$$\boxed{\begin{array}{l} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + l = 2j_k + l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m = 0 \end{array}}$$

3) On a :

$$\begin{aligned} & \int d\Omega_1 Y_{j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k - \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y^*_{j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k - \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1, \varphi_1) \\ = \; & (-1)^{m_k - \frac{1}{2} + m} \int d\Omega_1 Y_{j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, m_k - \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y_{j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}, -m_k + \frac{1}{2}}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1, \varphi_1) \\ = \; & (-1)^{m_k - \frac{1}{2} + m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right) + 1\right]\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right) + 1\right](2l+1)}{4\pi}} \\ & \times \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2} - m_k & -\frac{1}{2} + m_k & -m \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ce terme est non nul si :

$$\boxed{\begin{array}{l} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} + l = 2j_k + l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m = 0 \end{array}}$$

4) On a :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}-m_k & \frac{1}{2}+m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ce terme est non nul si :

$$\boxed{\begin{array}{l} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=2j_k+l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m=0 \end{array}}$$

Pour le pion, on a :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l -m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l+1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $\boxed{m=0}$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$1 \leq l \leq 2l_l+1$$

Ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l-1 \\ m=0 \end{cases}}$$

et :

$$
\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \quad & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l -m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \quad & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l-1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

De même, ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$
\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l - 1 \\ m = 0 \end{cases}}
$$

On obtient finalement pour le deuxième terme :

$$
\begin{aligned}
& i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1) u^*_{n_l l_l l}(x_2) \nabla_0 \left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right] \tfrac{1}{x_{21}} \\
& = \alpha \textstyle\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \tfrac{4\pi}{2l+1} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \\
& \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \Bigg[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+0} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+0} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& - \sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+0} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}-m_k & -\frac{1}{2}+m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& - \sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+0} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}-m_k & \frac{1}{2}+m_k & 0 \end{pmatrix} \Bigg] \\
& \times \Bigg[\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l+1)+1](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l-1)+1](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix} \Bigg]
\end{aligned}
$$

Or :

$$
\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}
$$

soit :

$$
\begin{aligned}
& i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
& = \alpha \sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \frac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \left[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\right. \\
& + \sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& - \sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k-\frac{1}{2}}(-1)^{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}+l} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& \left. - \sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}}(-1)^{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}+l} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\right] \\
& \times \left[\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l+1)+1](2l+1)}{4\pi}}\right. \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l-1)+1](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \left.\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right]
\end{aligned}
$$

D'où :

$$
\begin{aligned}
& i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
& = \alpha \sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \frac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \left[-\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\right. \\
& +\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& +\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+2j+l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} \\
& \left.-\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+2j+l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\right] \\
& \times \left[\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l+1)+1](2l+1)}{4\pi}}\right. \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix} \\
& +\sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\frac{(2l_l+1)[2(l_l-1)+1](2l+1)}{4\pi}} \\
& \left.\times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right] \\
& \quad = \alpha \sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \\
& \quad \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \quad \times(-1)^{m_k+m_l+\frac{1}{2}}\left[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\left((-1)^{2j+l}-1\right)\right. \\
& \quad \left.+\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\left(1-(-1)^{2j_k+l}\right)\right] \\
& \quad \times \left[\sqrt{(l_l+1)^2-m_l^2}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right. \\
& \quad \left.+\sqrt{l_l^2-m_l^2}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right]
\end{aligned}
$$

Soit pour le deuxième terme :

$$
\begin{aligned}
& i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}} \\
& = \alpha \textstyle\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& \times (-1)^{m_k+m_l+\frac{1}{2}} \left((-1)^{2j_k+l} - 1\right) \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \left[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0 \end{pmatrix}\right] \\
& \times \left[\sqrt{(l_l+1)^2 - m_l^2}\, u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right) \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right. \\
& \left. + \sqrt{l_l^2 - m_l^2}\, u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right) \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l & 0 \end{pmatrix}\right]
\end{aligned}
$$

or $2j_k + l$ est pair, soit :

$$
\boxed{i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}} = 0}
$$

<u>Troisième terme</u> :

$$
\begin{aligned}
& -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
& = 2\alpha\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}} \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \\
& \times \int d\Omega_1 \left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right. \\
& \left. + \sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right] \\
& \times \int d\Omega_2 \left[\sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right) Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right. \\
& \left. - \sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right) Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right]
\end{aligned}
$$

On a :

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\\
=\;& (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m}\int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1)\\
=\;& (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m}\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & -m\end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ce terme est différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1\leq l\leq 2j_k \text{ et } 2j_k+l \text{ est pair}\\ m=-1\end{array}}$$

Pour :

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\\
=\;& (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m}\int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1)\\
=\;& (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m}\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}-m_k & -\frac{1}{2}+m_k & -m\end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ce terme est différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1\leq l\leq 2j_k \text{ et } 2j_k+l \text{ est pair}\\ m=-1\end{array}}$$

Pour le pion on a :

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\\
=\;& (-1)^{m_l}\int d\Omega_2 Y_{l_l-m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\\
=\;& (-1)^{m_l}\sqrt{\frac{[2l_l+1]\,[2\,(l_l+1)+1]\,(2l+1)}{4\pi}}\\
&\times\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l+1 & m\end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $\boxed{m=-1}$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l+1}$$

En ce qui concerne :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_2 Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int d\Omega_2 Y_{l_l -m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{[2l_l+1]\,[2\,(l_l-1)+1]\,(2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l+1 & m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l-1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. La présence du signe moins sous la racine rajoute la condition $l_l \geq 1$. Le second coefficient est aussi non nul si $\boxed{m=-1}$ et si :

$$|l_l-(l_l-1)| \leq l \leq 2l_l-1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l-1}$$

Des conditions précédentes, on a :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1 \leq l \leq \min(2l_l+1, 2j_k)\ ,\ m=-1 \text{ pour le terme électronique} \\ \text{et} \\ m=-1 \text{ pour le terme pionique.} \end{array}}$$

On obtient finalement pour le troisième terme :

$$
\begin{aligned}
&-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}}\\
&= \tfrac{2\alpha \mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\tfrac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2\\
&\times \tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\tfrac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times(-1)^{m_k+\frac{1}{2}-1}\left[\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 1\end{pmatrix}\right.\\
&\left.+\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}-m_k & -\frac{1}{2}+m_k & 1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\sqrt{\tfrac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\tfrac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\tfrac{(2l_l+1)[2(l_l+1)+1](2l+1)}{4\pi}}\right.\\
&\times\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\\
&-\sqrt{\tfrac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\tfrac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)(-1)^{m_l}\sqrt{\tfrac{(2l_l+1)[2(l_l-1)+1](2l+1)}{4\pi}}\\
&\left.\times\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right]
\end{aligned}
$$

d'où pour le troisième terme :

$$
\begin{aligned}
&-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\tfrac{1}{x_{21}}\\
&= \tfrac{2\alpha \mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2\\
&\times \tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\tfrac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times(-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\\
&\times\left\{\left[\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 1\end{pmatrix}+\right.\right.\\
&\left.\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ -\frac{1}{2}-m_k & -\frac{1}{2}+m_k & 1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\sqrt{\tfrac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\tfrac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right.\\
&\left.\left.-\sqrt{\tfrac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\tfrac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right]\right\}
\end{aligned}
$$

On a donc en regroupant tous les termes :

$$\begin{aligned}
\triangle E_d^{B_1} &= -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
&\quad +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{0}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{0}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}} \\
&\quad -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\triangle E_d^{B_1} = 2\alpha\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \\
&\times\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
&\times(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \\
&\times\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -1\end{pmatrix}\right. \\
&\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2}-m_k & m_k+\frac{1}{2} & -1\end{pmatrix}\right] \\
&\times\left[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\right. \\
&\left.-\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\right] \\
&+\frac{2\alpha\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \\
&\times\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
&\times(-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \\
&\times\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & +1\end{pmatrix}\right. \\
&\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ -\frac{1}{2}-m_k & -\frac{1}{2}+m_k & +1\end{pmatrix}\right] \\
&\times\left[\sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right. \\
&\left.-\sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\alpha\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times\left\{(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right.\\
&\times\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -1\end{pmatrix}\right.\\
&\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ \frac{1}{2}-m_k & m_k+\frac{1}{2} & -1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\right.\\
&\left.\left.-\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l-1 & +1\end{pmatrix}\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\right]\right\}\\
&-\frac{2\alpha\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\sqrt{\frac{\left[2\left(j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}\\
&\times(-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}(-1)^{2j_k+l}\\
&\times\left\{\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ \frac{1}{2}-m_k & \frac{1}{2}+m_k & -1\end{pmatrix}\right.\right.\\
&\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l\\ \frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & -1\end{pmatrix}\right]\\
&\times\left[\sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right.\\
&\left.\left.-\sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ -m_l & m_l+1 & -1\end{pmatrix}\right]\right\}
\end{aligned}
$$

On a donc, puisque $2j_k + l$ est pair :

$$\boxed{\begin{array}{l}
\Delta E_d^{B_1} = 2\alpha \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \\
\times \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \sqrt{\frac{\left[2\left(j-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
\times \Bigg\{ (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\times \Bigg[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ m_k + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} - m_k & -1 \end{pmatrix} \\
+ \sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2} - m_k & m_k + \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \Bigg] \\
\times \Bigg[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
- \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
- \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
+ \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \Bigg] \Bigg\}
\end{array}}$$

Calcul de $\triangle \mathbf{E}_\mathbf{d}^{\mathbf{B_2}}$ Celui-ci se compose de trois termes :

$$\boxed{\begin{array}{rl}
\triangle E_d^{B_2} = & +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{+1} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_{-1} \left[u_l^*(x_2) \right] \frac{1}{x_{21}} \\
& -i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_0 \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_0 \left[u_l^*(x_2) \right] \frac{1}{x_{21}} \\
& +i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha_{-1} \phi_k(x_1) u_l(x_2) \nabla_{+1} \left[u_l^*(x_2) \right] \frac{1}{x_{21}}
\end{array}}$$

Nous voyons que c'est la partie pionique qui change :

$$\boxed{\begin{array}{l}
u_{n_l l_l}(r_2) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) \nabla_{+1} \left[u_{n_l l_l}(r_2) Y_{l_l m_l}^*(\theta_2, \varphi_2) \right] = \\
\sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_l+1 m_l+1}^*(\theta_2, \varphi_2) \\
- \sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_l-1 m_l+1}^*(\theta_2, \varphi_2)
\end{array}}$$

et :

$$\boxed{\begin{array}{l}
u_{n_l l_l}(r_2) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) \nabla_0 \left[u_{n_l l_l}(r_2) Y_{l_l m_l}^*(\theta_2, \varphi_2) \right] = \\
\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_l+1 m_l}^*(\theta_2, \varphi_2) \\
+ \sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) Y_{l_l m_l}(\theta_2, \varphi_2) Y_{l_l-1 m_l}^*(\theta_2, \varphi_2)
\end{array}}$$

et :

$$\boxed{\begin{array}{l} u_{n_l l_l}(r_2) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l}(r_2) Y^*_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)\right] = \\ \sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) \\ -\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) \end{array}}$$

<u>Premier terme</u> :

On a :

$$+i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1) u^*_{n_l l_l}(x_2)\nabla_{-1}\left[u_{n_l l_l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}$$

$$= +i\alpha \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1}\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \int d^3x_2 \int d^3x_1$$

$$\times \frac{i\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\right.$$

$$\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\right]$$

$$\times\left[\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)\right.$$

$$\left.-\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2)\right]$$

Soit :

$$-\alpha\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{\sqrt{2}}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\frac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1)$$

$$\times\int d\Omega_1\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right.$$

$$\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right]$$

$$\times\int \Omega_2\left[\sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right.$$

$$\left.-\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}} u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l}\right) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right]$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}} Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On obtient un résultat non nul si :

$$\boxed{\begin{cases} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=(2j_k+l) \text{ est pair,} \\ \text{ or } 2j_k \text{ est toujours impair} \Rightarrow l \text{doit être impair} \\ \text{et} \\ \text{si } m=+1. \end{cases}}$$

Pour

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}-m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}-m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ m_k+\frac{1}{2} & \frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On obtient encore un résultat non nul si l est impair et $\boxed{m=+1}$. De plus, dans les deux cas précédents, on a :

$$\left|\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)-\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)\right| \leq l \leq 2j_k$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2j_k \text{ et impair}}$$

Pour le pion, on a :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1-m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l+1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ m_l & -m_l+1 & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $\boxed{m=-1}$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l+1}$$

En ce qui concerne :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1-m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l-1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ m_l & -m_l+1 & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

De même, ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l-1 \\ m=-1 \end{cases}}$$

En rassemblant les résultats précédents, on trouve pour le premier terme :

$$\boxed{-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{+1}\phi_k(x_1) u_{n_l l_l l}(x_2) \nabla_{-1}\left[u^*_{n_l l_l l}(x_2)\right] \tfrac{1}{x_{21}} = 0}$$

puisque le terme électronique est non nul si $m=+1$ et le terme pionique est non nul si $m=-1$.

Deuxième terme :

$$-i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_l l_l l}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}$$

$$= -\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\tfrac{1}{x_{21}}$$
$$\Bigg[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$+\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$-\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$-\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]$$

$$\times\Bigg[\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2)$$
$$+\sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2)\Bigg]$$

$$= -\alpha\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\tfrac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2 f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}$$
$$\Bigg[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$+\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$-\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$-\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\Bigg]$$

$$\times\Bigg[\sqrt{\frac{(l_l+1)^2-m_l^2}{(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)$$
$$+\sqrt{\frac{l_l^2-m_l^2}{(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_l l_l}\left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_l l_l}\right)\int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\Bigg]$$

1) On a donc :

$$
\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Ce terme est non nul si :

$$
\boxed{\begin{array}{l} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=2j_k+l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m=0 \end{array}}
$$

2) On a :

$$
\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Ce terme est non nul si :

$$
\boxed{\begin{array}{l} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}+l=2j_k+l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m=0 \end{array}}
$$

3) On a :

$$
\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k-\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ \frac{1}{2}-m_k & \frac{1}{2}+m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Ce terme est non nul si :

$$
\boxed{\begin{array}{l} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=2j_k+l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m=0 \end{array}}
$$

4) On a :

$$
\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \; & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ -\frac{1}{2}-m_k & \frac{1}{2}+m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Ce terme est non nul si :

$$
\boxed{\begin{array}{l} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}+l=2j_k+l \text{ est pair} \Rightarrow l \text{ est impair} \\ \text{et} \\ m=0 \end{array}}
$$

Pour le pion, on a :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1-m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l+1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ m_l & -m_l & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $\boxed{m=0}$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$1 \leq l \leq 2l_l+1$$

Ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l-1 \\ m=0 \end{cases}}$$

et :

$$\begin{aligned}
& \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \int \Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1-m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l_l+1)\left[2\left(l_l-1\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ m_l & -m_l & +m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

De même, ce terme sera différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{cases} 1 \leq l \leq 2l_l-1 \\ m=0 \end{cases}}$$

soit pour le deuxième terme :

$$-i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_ll_ll}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_ll_ll}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}$$
$$=-\alpha\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$
$$\times(-1)^{m_k+m_l+\frac{1}{2}}\left((-1)^{2j_k+l}-1\right)\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}$$
$$\times\left[\sqrt{\frac{\left(m_k-\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ -\frac{1}{2}+m_k & \frac{1}{2}-m_k & 0\end{pmatrix}-\sqrt{\frac{\left(m_k+\frac{1}{2}\right)^2-\kappa_k^2}{1-(2\kappa_k)^2}}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ \frac{1}{2}+m_k & -\frac{1}{2}-m_k & 0\end{pmatrix}\right]$$
$$\times\left[\sqrt{(l_l+1)^2-m_l^2}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l\\ m_l & -m_l & 0\end{pmatrix}\right.$$
$$\left.+\sqrt{l_l^2-m_l^2}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_ll_l}\right)\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l\\ m_l & -m_l & 0\end{pmatrix}\right]$$

or $2j_k+l$ est pair, d'où :

$$\boxed{-i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_0\phi_k(x_1)u^*_{n_ll_ll}(x_2)\nabla_0\left[u_{n_ll_ll}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}=0}$$

<u>Troisième terme</u> :

$$+i\alpha\int d^3x_2\int d^3x_1\phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1)u_{n_ll_ll}(x_2)\nabla_{+1}\left[u^*_{n_ll_ll}(x_2)\right]\frac{1}{x_{21}}$$
$$=-\frac{\alpha\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\frac{4\pi}{2l+1}\int r_1^2dr_1\int r_2^2dr_2\frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}}f_{n_k\kappa_k}(r_1)g_{n_k\kappa_k}(r_1)$$
$$\times\int d\Omega_1\left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m)^2}{1-(2\kappa_k)^2}}Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)\right]$$
$$\times\int d\Omega_2\quad\left[\sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2(2l_l+1)(2l_l+3)}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}-\frac{l_l}{r_2}u_{n_ll_l}\right)Y_{l_lm_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l+1m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right.$$
$$\left.-\sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2(2l_l-1)(2l_l+1)}}u_{n_ll_l}\left(\frac{du_{n_ll_l}}{dr_2}+\frac{l_l+1}{r_2}u_{n_ll_l}\right)Y_{l_lm_l}(\theta_2,\varphi_2)Y^*_{l_l-1m_l+1}(\theta_2,\varphi_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)\right]$$

On a :

$$\int d\Omega_1Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$=\quad(-1)^{m_k+\frac{1}{2}-m}\int d\Omega_1Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1)Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1)$$
$$=\quad(-1)^{m_k+\frac{1}{2}-m}\sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}}$$
$$\times\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l\\ m_k-\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}-m_k & -m\end{pmatrix}$$

Ce terme est différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1 \leq l \leq 2j_k \\ m = -1 \end{array}}$$

En ce qui concerne le terme :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m+\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \quad & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \int d\Omega_1 Y_{j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2},-m_k-\frac{1}{2}}(\theta_1,\varphi_1) Y_{l-m}(\theta_1,\varphi_1) \\
= \quad & (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m} \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k-\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & j_k+\frac{\mathrm{sgn}\kappa_\mathrm{k}}{2} & l \\ m_k-\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}-m_k & -m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ce terme est différent de zéro si et seulement si :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1 \leq l \leq 2j_k \\ m = -1 \end{array}}$$

Pour le pion, on a :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l+1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \quad & (-1)^{m_l+1} \int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l+1 -m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \quad & (-1)^{m_l+1} \sqrt{\frac{[2l_l+1]\,[2\,(l_l+1)+1]\,(2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ m_l & -m_l-1 & m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l+1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. Le second coefficient est non nul si $\boxed{m=+1}$ et si :

$$|l_l-(l_l+1)| \leq l \leq 2l_l+1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l+1}$$

En ce qui concerne le terme :

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y^*_{l_l-1 m_l+1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l+1} \int d\Omega_2 Y_{l_l m_l}(\theta_2,\varphi_2) Y_{l_l-1-m_l-1}(\theta_2,\varphi_2) Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) \\
= \; & (-1)^{m_l+1} \sqrt{\frac{[2l_l+1]\,[2\,(l_l-1)+1]\,(2l+1)}{4\pi}} \\
& \times \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ m_l & -m_l-1 & m \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour que le coefficient $\begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ soit non nul, sachant que l est impair, il faut que $2l_l - 1$ soit impair, ce qui est toujours vrai. La présence du signe moins sous la racine rajoute la condition $l_l \geq 1$. Le second coefficient est aussi non nul si $\boxed{m = +1}$ et si :

$$|l_l - (l_l - 1)| \leq l \leq 2l_l + 1$$

soit :

$$\boxed{1 \leq l \leq 2l_l + 1}$$

Des conditions précédentes, on a :

$$\boxed{\begin{array}{l} 1 \leq l \leq \min(2l_l+1, 2j_k)\ ,\ m = -1 \text{ pour le terme électronique} \\ \text{ et} \\ m = +1 \text{ pour le terme pionique.} \end{array}}$$

On obtient finalement pour le troisième terme :

$$\boxed{+i\alpha \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1)\alpha_{-1}\phi_k(x_1) u^*_{n_l l_l l}(x_2) \nabla_{+1}\left[u_{n_l l_l l}(x_2)\right] \tfrac{1}{x_{21}} = 0}$$

On a donc en regroupant tous les termes :

$$\boxed{\triangle \mathrm{E}_d^{B_2} = 0}$$

On obtient finalement :

$$\Delta E_d^B = \Delta E_d^{B_1} + \Delta E_d^{B_2}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}
&\Delta E_d^B = 2\alpha \tfrac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}} \textstyle\sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \\
&\times \tfrac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \sqrt{\tfrac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
&\times \Bigg\{ (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\times \Bigg[\sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ m_k + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} - m_k & -1 \end{pmatrix} \\
&+ \sqrt{\tfrac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2} - m_k & m_k + \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \Bigg] \\
&\times \Bigg[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\tfrac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \tfrac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
&- \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\tfrac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \tfrac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
&- \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\tfrac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \tfrac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
&+ \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\tfrac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}} u_{n_l l_l} \left(\tfrac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \tfrac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \Bigg] \Bigg\}
\end{aligned}$$

Soit, en arrangeant la partie pionique :

$$\boxed{\begin{array}{l}
\Delta E_d^B = 2\alpha \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{\sqrt{2}} \sum_{l=1}^{\min(2l_l+1,2j_k)} \int r_1^2 dr_1 \int r_2^2 dr_2 \\
\times \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} f_{n_k\kappa_k}(r_1) g_{n_k\kappa_k}(r_1) \sqrt{\frac{\left[2\left(j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right]\left[2\left(j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa}{2}\right)+1\right](2l+1)}{4\pi}} \\
\times \left\{ (-1)^{m_k+\frac{1}{2}+m_l} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
\times \left[\sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k-m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ m_k + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} - m_k & -1 \end{pmatrix} \right. \\
\left. + \sqrt{\frac{\frac{1}{4}-(\kappa_k+m_k)^2}{1-(2\kappa_k)^2}} \begin{pmatrix} j_k - \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & j_k + \frac{\mathrm{sgn}\kappa_k}{2} & l \\ \frac{1}{2} - m_k & m_k + \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \right] \\
\times \left[\begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l-m_l+1)(l_l-m_l+2)}{2}} \right. \right. \\
\left. - \begin{pmatrix} l_l & l_l+1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l+m_l+1)(l_l+m_l+2)}{2}} \right\} \times u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} - \frac{l_l}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \\
+ \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l+1 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l-m_l-1)(l_l-m_l)}{2}} \right. \\
\left. \left. - \begin{pmatrix} l_l & l_l-1 & l \\ -m_l & m_l-1 & +1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{(l_l+m_l-1)(l_l+m_l)}{2}} \right\} \times u_{n_l l_l} \left(\frac{du_{n_l l_l}}{dr_2} + \frac{l_l+1}{r_2} u_{n_l l_l} \right) \right] \right\}
\end{array}}$$

Cette expression est en cours d'insération dans le programme MDFGME de J.P. Desclaux et de P. Indelicato. Toutefois, nous avons réalisé une série de calculs dans quelques atomes pioniques et muoniques supposés hydrogénoïdes. Les valeurs des énergies de transition devront être améliorées dans les cas où des électrons sont toujours présents pendant la cascade. Ceci deviendra possible une fois que le terme de Breit aura été mis dans le programme. Pour l'instant, nous ne pouvons tenir compte que de l'interaction coulombienne entre le pion et l'électron. Celle-ci provient de :

$$\triangle E^C = \int d^3x_2 \int d^3x_1 \phi_k^+(x_1) \alpha^0 \phi_k(x_1) \frac{e^2}{4\pi x_{21}} \left[\zeta_l^*(x_2) i\partial_0 \left(\zeta_l(x_2)\right) - \zeta_l(x_2) i\partial_0 \left(\zeta_l^*(x_2)\right) \right] \tag{7.23}$$

7.1.4 Effet de l'écrantage

Comme nous l'avons dit, le terme de Breit est en cours de programmation et nous ne pouvons pour le moment que tenir compte de la partie coulombienne de l'interaction pion-électron. Nous avons effectué le calcul pour trois Z différents, $Z = 4$, $Z = 12$ et $Z = 54$, et nous considérons dans chaque cas la présence d'aucun électron ou d'un électron ou de deux électrons.

TAB. 7.1 – Effets de l'écrantage des électrons en (eV)

^{9}Be : Transition $4f - 3d$	Aucun électron	Un électron K	Deux électrons K
Klein-Gordon (fin. nucl.)	2843.259	2843.168	2843.116
Uehling ($\alpha Z\alpha$)	0.937	0.937	0.937
Wichman and Kroll ($\alpha(Z\alpha)^3$)	0.000	0.000	0.000
Kallën and Sabry ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.008	0.008	0.008
Loop after loop Uehling ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.001	0.001	0.001
Relat. recoil	0.002	0.002	0.002
Total	2844.207	2844.116	2844.063
^{24}Mg : Transition $4f - 3d$	Aucun électron	Un électron K	Deux électrons K
Klein-Gordon (fin. nucl.)	25867.915	25867.418	25864.135
Uehling ($\alpha Z\alpha$)	49.966	49.966	49.970
Wichman and Kroll ($\alpha(Z\alpha)^3$)	-0.039	-0.039	-0.039
Kallën and Sabry ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.363	0.363	0.363
Loop after loop Uehling ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.107	0.107	0.105
Relat. recoil	0.053	0.053	0.051
Total	25918.367	25917.870	25914.586
^{132}Xe : Transition $8k - 7i$	Aucun électron	Un électron K	Deux électrons K
Klein-Gordon (fin. nucl.)	51872.083	51848.372	51825.290
Uehling ($\alpha Z\alpha$)	84.353	84.330	84.310
Wichman and Kroll ($\alpha(Z\alpha)^3$)	-1.506	-1.506	-1.506
Kallën and Sabry ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.629	0.629	0.629
Loop after loop Uehling ($\alpha^2 Z\alpha$)	0.195	0.195	0.192
Relat. recoil	0.082	0.082	0.081
Total	51955.835	51932.100	51908.994

Les résultats montrent qu'au fur et à mesure qu'augmente la valeur de Z, la correction due à la présence d'électrons est de plus en plus importante, celle-ci pouvant atteindre plusieurs dizaines d'électron-volts pour des valeurs de Z grandes. Nous voyons donc l'intérêt qu'il y a d'avoir une valeur précise de la correction causée par l'interaction pion-électron.

Ainsi, comme nous l'avons signalé au début de la section, l'incertitude principale sur les mesures effectuées provient de la masse du pion chargé. Avec le système utilisé par les expérimentateurs, à savoir une cible gazeuse, les calculs que nous avons effectués concernant les atomes dans la zone ou l'on peut considérer l'atome pionique comme hydrogénoïde nous ont permis de déterminer la masse du pion. Ces calculs constituent le sujet de la prochaine section.

7.1.5 Détermination de la masse du pion chargé

Nous avons utilisé le programme de J.P. Desclaux et de P. Indelicato dont nous avons parlé au troisième chapitre de la thèse. Nous avons tenu compte des principaux effets rentrant dans la détermination de l'énergie d'un atome exotique, à savoir la polarisation du vide et la taille finie du noyau.

Polarisation du vide

Elle résulte de l'interaction de la particule chargée entourée de son nuage de particules virtuelles avec le noyau. Un photon virtuel peut être échangé avec le noyau considéré dans ce cas comme une source classique. Ce photon peut virtuellement générer une paire électron-positron. A cause de la présence du noyau, le vide se comporte alors comme un diélectrique et est polarisé, l'électron étant attiré par le noyau et le positron repoussé. A l'ordre le plus bas en la constante de couplage $Z\alpha$ avec le champ extérieur, la paire est supposée se déplacer librement. Cette paire virtuelle provoque une modification du potentiel coulombien en $1/r$ et entraîne ainsi un déplacement en énergie de l'état occupé par la particule exotique. La correction d'ordre le plus bas porte le nom de correction de Uehling. Cette correction constitue la correction radiative dominante dans les atomes pioniques et muoniques dans lesquels l'autre correction radiative, dont nous avons parlé dans le second chapitre (l'énergie propre : S.-E.), joue un rôle beaucoup moins important. La raison provient de la masse énorme des particules exotiques comparée à la masse d'un électron [3]. Ceci augmente la densité de probabilité que la particule soit proche du noyau où la polarisation du vide est plus importante.

La valeur numérique de ce potentiel est assez facile à calculer. Dans les calculs, nous avons donc tenu compte de la polarisation du vide de manière auto-cohérente. De plus, nous avons tenu compte des corrections au potentiel de Uehling dues à la taille finie du noyau.

[3] Par exemple, nous avons $m_{\pi^-} \approx 273 \times m_{e^-}$

Résultats

Nous avons obtenu pour les énergies de transitions dans des atomes pioniques et muoniques à l'approximation hydrogénoïde :

TAB. 7.2 – Atomes pioniques : Energie de transition (eV), aucun électron

Eléments	$8k-7i$	$7i-6h$	$6h-5g$	$5g-4f$	$4f-3d$
H	15.473	23.840	39.538	72.786	157.255
Deutérium	16.544	25.490	42.274	77.823	168.136
Tritium	16.934	26.090	43.270	79.656	172.097
^{3}He	67.734	104.360	173.078	318.623	688.420
^{4}He	68.534	105.593	175.122	322.386	696.552
^{9}Be	279.750	431.025	714.849	1316.064	2844.207
^{12}C	632.021	973.798	1615.100	2973.826	6428.781
^{13}C	632.623	974.726	1616.639	2976.662	6434.915
^{14}N	861.781	1327.820	2202.335	4055.381	8768.122
^{15}N	862.388	1328.756	2203.887	4058.240	8774.308
^{16}O	1127.094	1736.637	2880.506	5304.575	11470.548
^{18}O	1128.260	1738.434	2883.488	5310.070	11482.439
^{19}F	1428.600	2201.240	3651.278	6724.510	14542.862
^{20}Ne	1764.428	2718.754	4509.894	8306.448	17966.245
^{22}Ne	1766.095	2720.600	4512.948	8312.078	17978.429
^{24}Mg	2544.068	3920.271	6503.575	11980.262	25918.367
^{26}Mg	2545.283	3922.145	6506.685	11985.993	25930.774
^{28}Si	3466.077	5341.337	8861.897	16326.867	35329.580
^{29}Si	3466.714	5342.320	8863.529	16329.873	35336.090
^{31}P	3981.133	6135.237	10179.546	18755.753	40589.754
^{32}S	4531.587	6982.121	11585.212	21347.123	46202.702
^{34}S	4532.987	6984.039	11588.393	21352.988	46215.401
^{35}Cl	5116.839	7885.930	13085.495	24113.171	52194.964
^{37}Cl	5118.020	7887.750	13088.516	24118.742	52207.028
^{36}Ar	5738.784	8842.766	14673.867	27041.894	58540.702
^{40}Ar	5739.886	8846.429	14679.965	27053.137	58565.052
^{84}Kr	23035.276	35522.185	58992.385	58992.385	58992.385
^{86}Kr	23036.232	35523.661	58994.836	58994.836	58994.836
^{129}Xe	51954.461	80164.318	133248.387	246246.012	536062.523
^{131}Xe	51955.384	80165.743	133250.757	246250.396	536066.827
^{132}Xe	51955.833	80166.436	133251.910	246252.527	536068.834

TAB. 7.3 – Atomes muoniques : Energie de transition (eV), aucun électron

Eléments	$8k_{15/2} - 7i_{13/2}$	$8k_{13/2} - 7i_{13/2}$	$8k_{13/2} - 7i_{11/2}$
H	12.094	12.094	12.094
Deutérium	12.739	12.739	12.739
Tritium	12.968	12.968	12.968
^{3}He	51.873	51.873	51.873
^{4}He	52.341	52.341	52.341
^{9}Be	212.623	212.621	212.624
^{12}C	479.891	479.885	479.898
^{13}C	480.239	480.232	480.245
^{14}N	654.066	654.054	654.079
^{15}N	654.416	654.404	654.428
^{16}O	855.154	855.133	855.175
^{18}O	855.825	855.804	855.846
^{19}F	1083.521	1083.487	1083.555
^{20}Ne	1338.092	1338.040	1338.143
^{22}Ne	1338.779	1338.727	1338.830
^{24}Mg	1928.723	1928.615	1928.830
^{26}Mg	1929.421	1929.314	1929.528
^{28}Si	2627.077	2626.877	2627.275
^{29}Si	2627.443	2627.243	2627.641
^{31}P	3017.028	3016.764	3017.289
^{32}S	3433.189	3432.848	3433.527
^{34}S	3433.903	3433.561	3434.241
^{35}Cl	3877.036	3876.601	3877.467
^{37}Cl	3877.713	3877.278	3878.145
^{36}Ar	4347.100	4346.553	4347.642
^{40}Ar	4348.467	4347.920	4349.009
^{84}Kr	17435.566	17426.785	17444.279
^{86}Kr	17436.114	17427.333	17444.827
^{129}Xe	39301.073	39256.498	39345.379
^{131}Xe	39301.602	39257.026	39345.908
^{132}Xe	39301.859	39257.283	39346.165

TAB. 7.4 – Atomes muoniques : Energie de transition (eV), aucun électron

Eléments	$7i_{13/2} - 6h_{11/2}$	$7i_{11/2} - 6h_{11/2}$	$7i_{11/2} - 6h_{9/2}$
H	18.634	18.634	18.634
Deutérium	19.627	19.627	19.627
Tritium	19.981	19.981	19.981
^{3}He	79.923	79.923	79.923
^{4}He	80.644	80.644	80.644
^{9}Be	327.598	327.595	327.601
^{12}C	739.394	739.381	739.411
^{13}C	739.929	739.916	739.946
^{14}N	1007.760	1007.735	1007.790
^{15}N	1008.299	1008.274	1008.329
^{16}O	1317.596	1317.554	1317.648
^{18}O	1318.631	1318.589	1318.683
^{19}F	1669.473	1669.405	1669.556
^{20}Ne	2061.734	2061.630	2061.860
^{22}Ne	2062.792	2062.688	2062.919
^{24}Mg	2971.860	2971.645	2972.123
^{26}Mg	2972.936	2972.722	2973.199
^{28}Si	4048.051	4048.218	4049.103
^{29}Si	4048.616	4047.653	4048.539
^{31}P	4649.015	4648.490	4649.657
^{32}S	5290.394	5289.715	5291.226
^{34}S	5291.494	5290.815	5292.326
^{35}Cl	5974.469	5973.603	5975.529
^{37}Cl	5975.514	5974.647	5976.574
^{36}Ar	6698.979	6697.890	6700.312
^{40}Ar	6701.086	6699.997	6702.420
^{84}Kr	26880.202	26862.709	26901.666
^{86}Kr	26881.048	26863.553	26902.512
^{129}Xe	60616.493	60527.612	60725.765
^{131}Xe	60617.309	60528.427	60726.582
^{132}Xe	60617.705	60528.823	60726.979

TAB. 7.5 – Atomes muoniques : Energie de transition (eV), aucun électron

Eléments	$6h_{11/2} - 5g_{9/2}$	$6h_{9/2} - 5g_{9/2}$	$6h_{9/2} - 5g_{7/2}$
H	30.904	30.904	30.904
Deutérium	32.550	32.550	32.550
Tritium	33.137	33.137	33.137
^{3}He	132.549	132.549	132.550
^{4}He	133.745	133.744	133.745
^{9}Be	543.312	543.306	543.321
^{12}C	1226.288	1226.258	1226.335
^{13}C	1227.175	1227.145	1227.222
^{14}N	1671.398	1671.343	1671.486
^{15}N	1672.292	1672.237	1672.380
^{16}O	2185.314	2185.220	2185.464
^{18}O	2187.030	2186.936	2187.180
^{19}F	2768.988	2768.837	2769.228
^{20}Ne	3419.682	3419.452	3420.049
^{22}Ne	3421.438	3421.208	3421.805
^{24}Mg	4929.556	4929.079	4930.317
^{26}Mg	4931.342	4930.865	4932.103
^{28}Si	6715.131	6714.245	6716.542
^{29}Si	6716.067	6715.182	6717.479
^{31}P	7712.309	7711.142	7714.170
^{32}S	8776.610	8775.099	8779.020
^{34}S	8778.436	8776.924	8780.846
^{35}Cl	9911.821	9909.895	9914.894
^{37}Cl	9913.555	9911.628	9916.628
^{36}Ar	11114.198	11111.776	11118.062
^{40}Ar	11117.697	11115.274	11121.562
^{84}Kr	44623.631	44584.674	44685.934
^{86}Kr	44625.035	44586.076	44687.340
^{129}Xe	100689.414	100491.261	101007.207
^{131}Xe	100690.769	100492.613	101008.567
^{132}Xe	100691.428	100493.271	101009.228

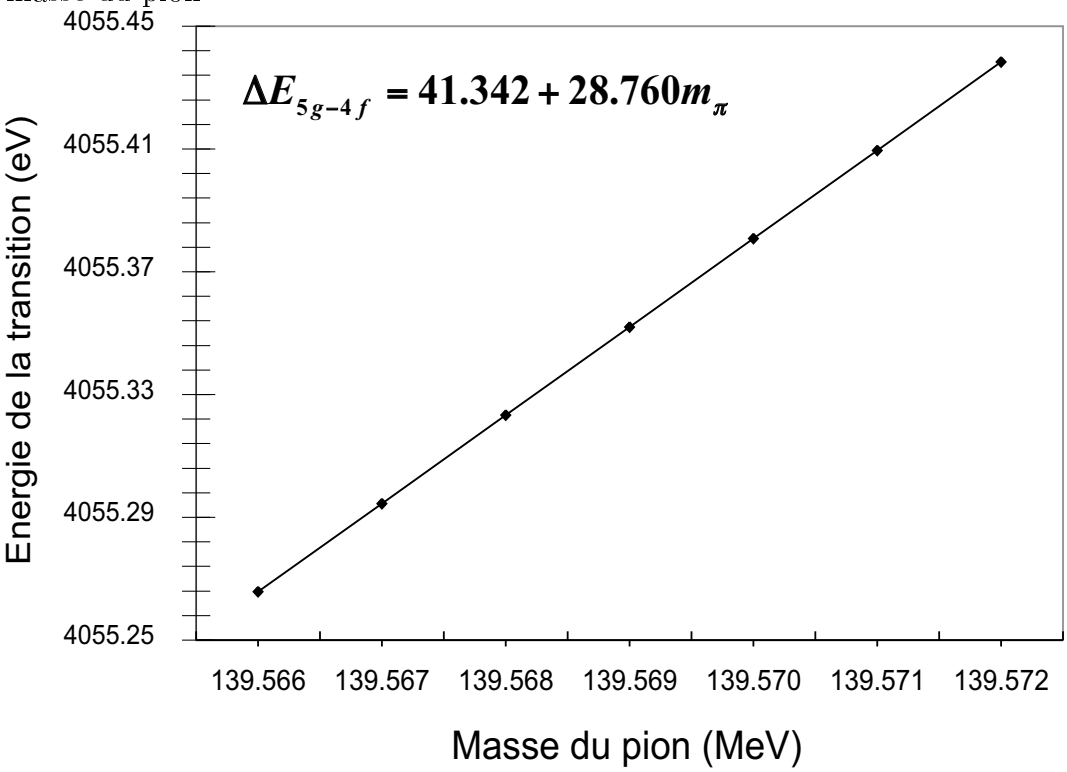
TAB. 7.6 – Atomes muoniques : Energie de transition (eV), aucun électron

Eléments	$5g_{9/2} - 4f_{7/2}$	$5g_{7/2} - 4f_{7/2}$	$5g_{7/2} - 4f_{5/2}$
H	56.891	56.891	56.891
Deutérium	59.922	59.922	59.922
Tritium	61.003	61.003	61.003
^{3}He	244.012	244.011	244.011
^{4}He	246.213	246.212	246.212
^{9}Be	1000.217	1000.202	1000.251
^{12}C	2257.705	2257.628	2257.878
^{13}C	2259.339	2259.262	2259.512
^{14}N	3077.336	3077.193	3077.658
^{15}N	3078.982	3078.839	3079.305
^{16}O	4023.752	4023.509	4024.303
^{18}O	4026.913	4026.669	4027.464
^{19}F	5098.736	5098.344	5099.619
^{20}Ne	6297.262	6296.666	6298.609
^{22}Ne	6300.497	6299.900	6301.845
^{24}Mg	9078.705	9077.467	9081.503
^{26}Mg	9081.996	9080.758	9084.795
^{28}Si	12368.578	12366.282	12373.770
^{29}Si	12370.304	12368.008	12375.497
^{31}P	14206.064	14203.036	14212.911
^{32}S	16167.378	16163.457	16176.247
^{34}S	16170.743	16166.821	16179.614
^{35}Cl	18259.516	18254.517	18270.828
^{37}Cl	18262.712	18257.711	18274.025
^{36}Ar	20475.590	20469.304	20489.815
^{40}Ar	20482.038	20475.751	20496.267
^{84}Kr	82278.738	82177.478	82508.718
^{86}Kr	82281.327	82180.064	82511.315
^{129}Xe	185824.818	185308.871	187002.137
^{131}Xe	185827.323	185311.369	187004.657
^{132}Xe	185828.540	185312.583	187005.882

Pour obtenir la masse du pion chargé π^-, nous avons considéré la variation de l'énergie de la transition $5g - 4f$ de ^{14}N en fonction de la masse du pion. Pour cet élément, comme nous l'avons dit précédemment, le fait de considérer que tous les électrons ont été éjectés est valable. Donc, les calculs que nous avons effectués se trouvent justifiés dans ce cas et, de plus, c'est cet élément qui est utilisé par l'équipe expérimentale.

Les valeurs de la masse que nous avons choisies couvrent le domaine où la masse du pion est attendue. Dans le cadre de l'approximation retenue, la dépendance est linéaire comme le montre la figure [7.1].

FIG. 7.1 – Variation de l'énergie de la transition $5g - 4f$ en fonction de la masse du pion



Les valeurs précises des coefficients de cette droite ($y = ax + b$) sont :

$$a = 28,76000$$
$$b = 41,342403$$

Ce qui donne pour la masse du pion, en utilisant la valeur expérimentale de la transition $5g - 4f$:

$$m_{\pi^-} = 139.57070 \pm 0.00056 MeV/c^2 \tag{7.24}$$

soit une précision de 4 ppm.

Limite supérieure de la masse du neutrino muonique

Depuis que Pauli a émis l'hypothèse de l'existence du neutrino afin d'expliquer le spectre en énergie obtenu lors d'une désintégration β, deux questions importantes se sont posées concernant les neutrinos :

1) Ont-ils une masse non nulle ?
2) Si c'est le cas, quelles sont les valeurs de ces masses ?

Dans le cadre du modèle standard, les neutrinos sont supposés avoir une masse nulle. Cependant, il n'y a aucune motivation théorique irréfutable à cette hypothèse. En fait, toute extension du modèle standard ayant pour but l'unification des interactions forte et électrofaible prédit que les neutrinos doivent avoir une masse au repos non nulle. Ceci a des conséquences importantes en Astrophysique et en Cosmologie.

On classe les expériences ayant pour but de déterminer la masse des neutrinos en deux catégories : les expériences directes et les expériences indirectes.
Les mesures directes sont effectuées par des analyses précises de la cinématique de processus de désintégration en physique nucléaire ou en physique des particules, ou par des mesures en temps de vol de neutrinos issus de supernovae.
Les méthodes indirectes, comme la mise en évidence des *oscillations de neutrinos* [130], nécessitent que les neutrinos possèdent une masse au repos non nulle. Les mesures d'oscillations fournissent la méthode la plus précise pour étudier la masse des neutrinos. Cependant, ces mesures ne peuvent fournir que le carré de la différence des masses. Donc, ces expériences révèlent que les neutrinos ont une masse mais elles ne peuvent rien dire en ce qui concerne les masses elles-mêmes. Toutefois, ces expériences répondent à la première question, à savoir que les neutrinos ont une masse.

La limite directe de la masse du neutrino muonique est basée sur des mesures cinématiques concernant la réaction :

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \tag{7.25}$$

Cette simple désintégration à deux corps demeure la méthode la plus précise pour obtenir une limite à la valeur de m_{ν_μ}. Dans cette désintégration, on doit mesurer précisément l'impulsion du muon produit par le pion au repos et la combiner avec les valeurs connues de la masse du pion et de la masse

du muon. En effet, dans le référentiel de repos du pion, les deux masses sont reliées par la relation :

$$m_{\nu_\mu}^2 = m_{\pi^+}^2 + m_{\mu^+}^2 - 2m_{\pi^+}^2\sqrt{m_{\pi^+}^2 + p_{\mu^+}^2},$$

où m_{μ^+} et p_{μ^+} sont respectivement les masse et impulsion du muon. Dans le cadre de la physique atomique des atomes exotiques, c'est la masse du π^- qui est obtenue à partir des raies X obtenues lors de la transition du pion vers le niveau fondamental. Cependant, la symétrie CPT entraîne que $m_{\pi^+} = m_{\pi^-}$ et nous avons donc :

$$m_{\nu_\mu}^2 = m_{\pi^-}^2 + m_{\mu^+}^2 - 2m_{\pi^-}^2\sqrt{m_{\pi^+}^2 + p_{\mu^+}^2} \tag{7.26}$$

La masse du muon est bien connue et possède l'incertitude la plus petite (0.05 ppm). Donc, plus la mesure de la masse du pion sera précise, meilleure sera l'estimation de la limite supérieure de m_{ν_μ}.

En utilisant la valeur de l'impulsion du muon donnée dans la référence [131] :

$$p_{\mu^-} = 29.79207 \pm 0.00012 MeV/c, \tag{7.27}$$

et la masse du muon donnée dans la référence [132] :

$$m_{\mu^-} = 105.658389 \pm 0.000034 MeV/c^2, \tag{7.28}$$

nous déduisons de (7.26) :

$$m_{\nu_\mu}^2 = 0.0231 \pm 0.0223 MeV^2/c^4 \tag{7.29}$$

Ceci nous permet d'en déduire une limite supérieure pour la masse du neutrino muonique :

$$m_{\nu_\mu} < 213 keV/c^2 \tag{7.30}$$

7.2 Les cascades muoniques dans les atomes et les molécules de bas Z, isolés

7.2.1 Introduction

Ce travail a été effectué à la demande de l'équipe expérimentale, ceci afin de comparer les résultats de leur programme cascade avec ceux du programme MDFGME concernant les tansitions Auger susceptibles de se produire.

7.2.2 Article

Résumé :

Les rayons X issus des cascades muoniques dans B, C, N et Ne, suivant la formation d'atomes muoniques dans B_2H_6, CH_4, C_2H_6, C_4H_10, N_2, O_2 et Ne sont étudiés. La densité des diverses sources gazeuses est assez basse pour éviter tout contact des atomes ou des molécules dans lesquels la formation se produit et ce avec les atomes ou les molécules les entourant lors de la cascade. En utilisant des détecteurs à semi-conducteurs, les productions de transitions en plusieurs séries avec des énergies entre 1.5 keV et 300 keV ont été mesurées. Les calculs des cascades ont été effectués afin d'expliquer les transitions observées. Les cascades ont pu être reproduites par la variation de seulement deux paramètres : le nombre d'électrons et la distribution du moment angulaire du muon au commencement des calculs. La cascade du μNe formé dans le néon mono-atomique a été la mieux décrite. De plus, les cascades dans le carbone muonique se sont révélées différentes suivant le type hydrocarbure utilisé, prouvant l'influence sur la cascade muonique de la molécule qui capture le muon. En variant le nombre d'électrons initialement disponibles, les effets moléculaires ont pu être décrits avec le programme cascade.

Chapitre 8

Conclusion et Perspectives

Dans ce mémoire, nous avons étudié l'importance de la corrélation sur les énergies de liaison totales de plusieurs ions. Dans certains cas, cela nous a permis de déterminer le niveau fondamental de l'ion lorsque ce dernier n'était pas connu. Nous nous sommes également intéressé à l'influence de la corrélation sur les durées de vie du niveau métastable $^3P_2$ des gaz rares Ne, Ar, Kr et Xe.

Nous avons aussi poursuivi un travail commencé précédement concernant les transitions à deux photons. Nous avons obtenu une expression pour le taux d'émission spontanée à deux photons dans le cas d'atomes à N-électrons sous une forme adaptée à la méthode MCDF. Elle est actuellement en cours d'insération dans le programme MDFGME. Nous avons également obtenu au cours de ce travail une formule générale pour les transitions à deux photons dans les systèmes héliumoïdes.

Afin d'effectuer des tests de violation de parité selon la méthode sugérée dans la référence [133], il sera nécessaire d'obtenir l'expression du taux d'absorbsion. Ce dernier, ne nécessitant pas une sommation sur les états finals, sera plus facile à programmer.

Les calculs effectués dans les atomes exotiques ont eu pour objectif, d'une part, de fournir les énergies des transitions X de divers éléments pouvant servir à la calibration des expériences et, d'autre part, d'obtenir la masse du pion chargé π^-. A partir de celle-ci, nous avons pu obtenir une limite supérieure acceptable pour la masse du neutrino muonique. Dans l'avenir, afin d'obtenir des valeurs précises des énergies dans le cas ou des électrons sont encore présents après la cascade du pion, nous avons déterminé l'opérateur de Breit correspondant à l'interaction pion-électron. Cet opérateur est en cours d'insération dans le programme MDFGME.

Une application supplémentaire de cet opérateur pourra concerner l'hydrogène pionique. En effet, avec le développement de la spectroscopie X, il est désormais possible d'étudier le déplacement et l'élargissement des niveaux dus à l'interaction forte et ce, par exemple, dans le niveau fondamental de l'hydrogène pionique. C'est alors une manière de tester la théorie des perturbations chirale (CHPT) qui est l'approximation à basse énergie de la Chromodynamique Quantique (QCD). Il est donc intéressant de pouvoir évaluer la contribution électromagnétique totale[1] à un niveau pour obtenir de manière plus précise la correction due à l'interaction forte.

[1]En dehors des corrections radiatives.

Annexe A

Unités atomiques

On a :

$$m = e = \hbar = a_0 = 1 \tag{A.1}$$

où m est la masse de l'électron, e la charge de l'électron, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ et a_0 le rayon de la première orbite de Bohr de l'atome d'hydrogène. Quant à la constante de structure fine, elle est sans dimension et vaut :

$$\alpha = 7.297352533(27) \times 10^{-3} \tag{A.2}$$

La valeur de α est celle donnée à ce jour sur le site : *physics.nist.gov/constants*.

On rappelle que la perméabilité du vide et la permittivité du vide sont liées par la relation :

$$\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = \kappa^2$$

Celle-ci permet de passer d'un système d'unités électromagnétiques à un autre. En unités atomiques, $\kappa = 1$ et la vitesse de la lumière dans le vide a pour valeur :

$$c = \frac{1}{\alpha} \tag{A.4}$$

On en déduit immédiatement les valeurs des deux constantes électromagnétiques :

$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi} \tag{A.5}$$

$$\mu_0 = \frac{4\pi}{c^2} = 4\pi\alpha^2 \tag{A.6}$$

Annexe B

Rappels de Relativité Restreinte : Métrique et Notations

La notion fondamentale en relativité restreinte est celle d'événement qui est caractérisé par sa position dans l'espace et le temps auquel il se produit. On définit ce que l'on nomme le quadrivecteur espace-temps :

$$x^\mu = \{t, \vec{r}\} = \left\{x^0, x^1, x^2, x^3\right\} \tag{B.1}$$

Par la suite, nous prendrons le système d'unités naturel dans lequel $c = \hbar = 1$. La relativité restreinte affirme que la vitesse de la lumière est constante dans tous les référentiels d'inertie et ceci impose l'invariance de l'intervalle $ds^2 = dx^\mu dx_\mu$ lors d'une transformation de Lorentz. C'est donc une généralisation à l'espace-temps à 4 dimensions de l'idée de rotation. En effet, dans le cas d'une rotation dans l'espace euclidien à trois dimensions, c'est la quantité $ds^2 = x^2 + y^2 + z^2$, définissant une distance, qui est conservée.

L'espace des événements constitue ce que l'on appelle l'espace de Minkowski. Pour définir la notion de distance dans un espace, on a besoin de définir une métrique caractérisée par sa signature. Dans le cas Euclidien, la signature est (+ + +). Par contre dans l'espace de Minkowski, elle vaut (- + + +), c'est-à-dire que lorsqu'on forme la distance entre deux points de l'espace-temps, celle-ci ne contient pas que des carrés de coordonnées avec le même signe. Une telle métrique est dite pseudo-euclidienne. On a donc :

$$ds^2 = dx^\mu dx_\mu = (dt)^2 - (d\vec{r})^2, \tag{B.2}$$

où la convention d'Einstein a été utilisée avec la sommation sur les indices répétés en position haute et en position basse.

Les coordonnées possédant un indice en position haute sont appelées contravariantes et celles dont l'indice est en position basse covariantes. Cette distinction n'est pas fondamentale en relativité restreinte où l'espace est plat, mais elle l'est en relativité genérale où cette distinction est importante.

On passe des coordonnées contravariantes à celles covariantes grâce au tenseur métrique :

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{B.3}$$

soit,

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \qquad \text{et} \qquad x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu$$

Ceci permet d'écrire le produit scalaire de deux quadrivecteurs sous la forme :

$$x^\nu x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu x_\mu = (x^0)^2 - (\vec{x})^2$$

Dans cet espace quadridimensionnel, on peut également généraliser les opérateurs usuels du calcul tensoriel comme le gradient qui, dans sa forme quadridimensionnelle, s'écrit :

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left\{ \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right\} \tag{B.4}$$

On peut aussi construire un autre opérateur très utile et dénommé opérateur d'Alembertien :

$$\Box = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \triangle \tag{B.5}$$

Au début de cet appendice, on a défini le quadrivecteur espace-temps. Il en existe deux autres très importants. Le premier est le quadrivecteur Energie-Impulsion p^μ défini par :

$$p^\mu = \{E, \vec{p}\}\,, \tag{B.6}$$

où E est l'énergie de la particule et $\vec{p}$ son impulsion. On obtient l'opérateur quantique associé par le remplacement habituel : $p^\mu \to \hat{p}^\mu = i\partial_\mu$, soit :

$$\hat{p}^\mu = i \left\{ \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right\} \tag{B.7}$$

Remarque : *Nous utiliserons la notation $\hat{O}$ pour les opérateurs lorqu'il pourra y avoir un risque de confusion avec le quadrivecteur O.*
Le second est le quadripotentiel A^μ :

$$A^\mu = \left\{ \Phi, \vec{A} \right\}, \tag{B.8}$$

avec Φ le potentiel scalaire et $\vec{A}$ le potentiel vecteur.

Tout comme en calcul tensoriel habituel, on peut construire des tenseurs de rang supérieur à partir des vecteurs. On peut aussi construire des quadritenseurs à partir des quadrivecteurs , et en particulier le quadritenseur du champ électromagnétique $F^{\mu\nu}$ défini par :

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \tag{B.9}$$

qui est antisymétrique. Celui-ci peut être exprimé en fonction des champs électrique $\vec{E}$ et magnétique $\vec{B}$ grâce aux relations :

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\Phi \qquad \text{et} \qquad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{B.10}$$

Nous obtenons alors :

$$F^{\mu\nu} = \left\{-\vec{E}, \vec{B}\right\} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \tag{B.11}$$

Annexe C

Les harmoniques sphériques tensorielles

C.1 Propriétés générales des harmoniques sphériques tensorielles

Les harmoniques sphériques tensorielles $\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi)$ sont par définition les fonctions propres des opérateurs $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{S}}^2$ où $\hat{\mathbf{L}}$ est l'opérateur du moment cinétique orbital, $\hat{\mathbf{S}}$ l'opérateur de spin et $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, soit :

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{J}}^2\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi) &= J(J+1)\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi)\\
\hat{\mathbf{L}}^2\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi) &= L(L+1)\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi)\\
\hat{\mathbf{S}}^2\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi) &= S(S+1)\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi)
\end{aligned}$$

et

$$\hat{J}_z\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi) = M\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi)$$

Une harmonique sphérique tensorielle décrit la distribution angulaire et la polarisation des particules de spin S dans un état de moment cinétique total J, de projection M et de moment orbital L définis. Le spin S est appelé le rang de l'harmonique sphérique tensorielle.
La construction des harmoniques sphériques tensorielles peut être faite selon les règles habituelles du couplage de la mécanique quantique à partir des harmoniques sphériques scalaires $Y_{LM}(\theta,\phi)$ et des fonctions de spin $\chi_{L\mu}$ (fonctions propres de $\hat{\mathbf{S}}^2$ et de S_z) :

$$\mathbf{Y}_{JM}^{LS}(\theta,\phi) = \sum_{\mu} C_{LM-\mu,S\mu}^{JM} Y_{LM-\mu}(\theta,\phi)\chi_{S\mu} \tag{C.1}$$

Ce sont donc des produits tensoriels irréductibles (de rang J) d'harmoniques sphériques scalaires et de fonctions de spin :

$$\mathbf{Y}_{JM}^{LS} = \{Y_L \otimes \chi_S\}_J M$$

Pour un J et un S donnés, L a pour valeurs : $|J-S|, |J-S|+1, \cdots J+S$.

On va donner la définition de deux cas importants : les harmoniques sphériques spinorielles $S = 1/2$ et les harmoniques sphériques vectorielles $S = 1$. Il est important de signaler que ces noms ne sont pas réellement adaptés car les propriétés de transformations des harmoniques sphériques tensorielles lors de rotations du système de coordonnées sont déterminées par J et non par S !

C.2 Les harmoniques sphériques spinorielles

Les harmoniques sphériques spinorielles $\Omega_{JM}^{L}(\theta, \phi)$ sont définies comme des harmoniques sphériques tensorielles avec $S = \frac{1}{2}$ soit :

$$\Omega_{JM}^{L}(\theta, \phi) \equiv \mathbf{Y}_{JM}^{L\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \tag{C.2}$$

Les harmoniques sphériques spinorielles satisfont aux relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}^2 \Omega_{j,l,m} &= j(j+1)\Omega_{j,l,m} \\
\mathbf{l}^2 \Omega_{j,l,m} &= l(l+1)\Omega_{j,l,m} \\
\mathbf{s}^2 \Omega_{j,l,m} &= \frac{3}{4}\Omega_{j,l,m} \\
j_z \Omega_{j,l,m} &= m\Omega_{j,l,m}
\end{aligned}$$

Les harmoniques sphériques spinorielles peuvent être développées sur la base des fonctions de spin $\chi_{\frac{1}{2}\mu}$, soit :

$$\Omega_{JM}^{L}(\theta, \phi) = \sum_{\mu} C_{LM-\mu,\frac{1}{2}\mu}^{JM} Y_{LM-\mu}(\theta, \phi)\chi_{\frac{1}{2}\mu} \tag{C.3}$$

C.3 Les harmoniques sphériques vectorielles

Les harmoniques sphériques vectorielles $\mathbf{Y}_{JM}^{L}(\theta, \phi)$ sont définies comme des harmoniques sphériques tensorielles avec $S = 1$ soit :

$$\mathbf{Y}_{JM}^{L}(\theta, \phi) \equiv \mathbf{Y}_{JM}^{L1}(\theta, \phi) \tag{C.4}$$

Elles vérifient les équations :

$$\hat{\mathbf{J}}^2\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi) = J(J+1)\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi)$$
$$\hat{\mathbf{L}}^2\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi) = L(L+1)\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi)$$
$$\hat{\mathbf{S}}^2\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi) = 2\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi)$$

et

$$\hat{J}_z\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi) = M\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi)$$

Elles peuvent être obtenues par couplages à partir des harmoniques sphériques scalaires et des fonctions de spin (fonctions propres de $\hat{\mathbf{S}}^2$ et de S_z) $\chi_\mu = \mathbf{e}_\mu$. Les e_μ sont les vecteurs de base sphérique. On a donc :

$$\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi) = \sum_\mu C^{JM}_{LM-\mu,1\mu} Y_{LM-\mu}(\theta,\phi)\mathbf{e}_\mu \tag{C.5}$$

Pour un $J \neq 0$ donné, il y a trois valeurs possibles de L : $L = J, J \pm 1$. Si $J = 0$, on a uniquement $L = 1$.

Avec les $\mathbf{Y}^L_{JM}(\theta,\phi)$, d'autres harmoniques sphériques vectorielles sont largement utilisées. Il s'agit des $\mathbf{Y}^{(\lambda)}_{JM}(\theta,\phi)$, avec $\lambda = 0, \pm 1$. Celles-ci ne sont pas états propres de $\hat{\mathbf{L}}^2$ mais sont orientées de manière appropriée par rapport au vecteur unitaire $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$. Ces fonctions sont particulièrement bien adaptées pour développer le champ électromagnétique en multipôles ayant des propriétés de transversalité [1] bien définies puisque $\mathbf{k}$ est dirigé suivant $\mathbf{n}$.
Par définition, les harmoniques sphériques $\mathbf{Y}^{(1)}_{JM}(\theta,\phi)$ et $\mathbf{Y}^{(0)}_{JM}(\theta,\phi)$ sont transverses par rapport à $\mathbf{n}$ tandis que $\mathbf{Y}^{(-1)}_{JM}(\theta,\phi)$ est longitudinal, c'est-à-dire :

$$\mathbf{n}.\mathbf{Y}^{(1)}_{JM}(\theta,\phi) = \mathbf{n}.\mathbf{Y}^{(1)}_{JM}(\theta,\phi) = 0 \tag{C.6}$$
$$\mathbf{n} \times \mathbf{Y}^{(-1)}_{JM}(\theta,\phi) = 0 \tag{C.7}$$

[1] La propriété de transversalité d'un champ est une notion covariante de Lorentz

Bibliographie

[1] Erwin Schrödinger. *Annalen der Physik*, 4(**79**) :361–376, 1926. Springer-Verlag[1].

[2] Louis de Broglie. *Compte rendu de l'académie des sciences*, (**117**) :507–510, 1923. Gauthier-Villar[2].

[3] B. Cagnac et J.C. Pebay-Peyroula. *Physique Atomique.* Ed. Dunod, 1995. Volume I, p.163-165.

[4] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics.* Ed. Springer-Verlag, 1994. Chap. I, p.7-8.

[5] Otto Nachtmann. *Elementary Particle Physics.* Ed. Springer-Verlag, 1990.

[6] Niels Bohr. *Nature*, (**121**) :580–591[3], 1928.

[7] Max Planck. *Annalen der Physik*, (**4**) :553–563[4], 1901.

[8] Albert Einstein. *Annalen der Physik*, (**XVII**) :132–148[5], 1905.

[9] W. Heisenberg M. Born and P. Jordan. *Z.f.Phys*, (**35**) :557, 1925.

[10] Franz Gross. *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory.* Ed. Wiley-Interscience Publication, 1993. Chap. I, p.3-27.

[11] B. Hatfield. *Quantum Field Theory of Point Particles and Strings.* Ed. Addison-Wesley Publishing Company, 1992. Chap. II, p. 9-34.

[12] E.U. Condon et G.H. Shortley. *The Theory of Atomic Spectra.* Ed. Cambridge University Press, 1953. Chap. IV, p.79-82.

[13] E.C.C. Stückelberger. *Phys. Acta*, (**15**) :23, 1942.

[14] R.P. Feynman. *Phys. Rev.*, (**74**) :939, 1948.

[1] Cet article se trouve dans l'ouvrage, *Source et évolution de la physique quantique* (J.Leite Lopes et B. Escoubès; éd. MASSON), p. 99-111

[2] Id. p. 99-111

[3] Id. p. 133–152

[4] Id. p. 20–27

[5] Id. p. 28–40

[15] R.P. Feynman. *Phys. Rev.*, (**76**) :749, 1949.

[16] W. Heisenberg and W. Pauli. *Z. f. Phys.*, (**56**) :1, 1929.

[17] W. Heisenberg and W. Pauli. *Z. f. Phys.*, (**59**) :130, 1930.

[18] J.R. Oppenheimer. *Phys. Rev.*, (**35**) :461, 1930.

[19] V.F. Weisskofp. *Z. f. Phys.*, (**89**) :27, 1934.

[20] P.A.M. Dirac. In *XVII Conseil Solvay de Physique*, page 203, 1933.

[21] J.A. Wheeler. *Phys. Rev.*, (**52**) :1107, 1937.

[22] Jr. W.E. Lamb and R.C. Retherford. *Phys. Rev.*, (**72**) :241, 1947.

[23] H.A. Bethe. *Phys. Rev.*, (**72**) :339, 1947.

[24] N.M. Kroll and Jr. W.E. Lamb. *Phys. Rev.*, (**75**) :388, 1949.

[25] P. Kusch and H.M. Foley. *Phys. Rev.*, (**74**) :250, 1948.

[26] J.E. Nafe and E.B. Nelson. *Phys. Rev.*, (**73**) :718, 1948.

[27] J. Schwinger. *Phys. Rev.*, (**73**) :416, 1948.

[28] W.H. Furry. *Phys. Rev.*, (**81**) :115, 1951.

[29] M. Gell-Mann et F. Low. *Phys. Rev.*, (**84**) :350, 1951.

[30] J. Sucher. *Phys. Rev.*, (**239**) :1448, 1957.

[31] J. Goldstone. *Proc. Roy. Soc. London, A*, (**239**) :267, 1957.

[32] Steven Weinberg. *The Quantum Theory of Fields.* Cambridge University Press, 1998. Volumes I et II.

[33] Franz Gross. *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory.* Wiley-Interscience Publication, 1993.

[34] C. Itzykson and J.B. Zuber. *Quantum Field Theory.* Ed. McGraw-Hill, 1980.

[35] A.I. Akhiezer and V.B. Berestetskii. *Quantum Electrodynamics.* Ed. Willey and Sons, 1965.

[36] P. Indelicato. In H.F. Beyer and V.P. Shevelko, editors, *Atomic Physic with Heavy Ions*, volume 26 of *Atoms+Plasma*, pages 92–116, 1999.

[37] H.F. Beyer, H.-J. Kluge, and V.P. Shevelko. volume 19 of *Atoms+Plasma.* 1997.

[38] P. J. Mohr. *Phys. Rev. A*, (**32**) :1949, 1985.

[39] P. J. Mohr. *Phys. Rev. A*, (**26**) :2338, 1982.

[40] P. J. Mohr and Y.K. Kim. *Phys. Rev. A*, (**45**) :2727, 1992.

[41] P. J. Mohr. *Phys. Rev. A*, (**46**) :4421, 1992.

[42] P. J. Mohr, G. Plunien, and G. Soff. *Physics Reports*, (**293**) :227, 1998.

[43] G.W. Erickson and D.R. Yennie. *Ann. Phys., NY*, (**35**) :271, 1965.

[44] P. J. Mohr. *Phys. Rev. Lett.*, (**34**) :1975, 1975.

[45] M.I. Eides, H. Grotch, and V.A. Shelyuto. *Physics Reports*, (**342**) :63, 2001.

[46] E.A. Uehling. *Phys. Rev.*, (**48**) :55, 1935.

[47] J. Schwinger. *Phys. Rev.*, (**75**) :651, 1949.

[48] E.H. Wichmann et N.M. Kroll. *Phys. Rev.*, (**101**) :843, 1956.

[49] G. Soff and P.J. Mohr. *Phys. Rev. A*, (**38**) :5066, 1988.

[50] G. Plunien and G. Soff. In H.F. Beyer and V.P. Shevelko, editors, *Atomic Physic with Heavy Ions*, volume 26 of *Atoms+Plasma*, page 63, 1999.

[51] E.A. Hylleraas. *Z. Phys.*, (**54**) :347, 1929.

[52] F. Laloë C. Cohen-Tannoudji, B. Diu. *Mécanique Quantique*. Ed. Herman, 1973. T.II, p.1136-1143.

[53] D.R. Hartree. *The Calculation of Atomic Structures*. Ed. JOHN WILLEY and SONS, Inc., 1957.

[54] C. Froese-Fischer. *Computer Phys. Commun.*, (**1**) :151, 1969.

[55] C. Froese-Fischer, T. Brage, and P. Jönsson. *Computational Atomic Structure*. Ed. IoP, 1997.

[56] R.P. Feynman. *Phys. Rev.*, (**76**) :769, 1949.

[57] F.J. Dyson. *Phys. Rev.*, (**75**) :486, 1949.

[58] F.J. Dyson. *Phys. Rev.*, (**75**) :1736, 1949.

[59] M. Goeppert Mayer. *Phys. Rev.*, (**75**) :1969, 1949.

[60] K.A. Brueckner and C.A. Levinson. *Phys. Rev.*, (**97**) :1344, 1955.

[61] J. Goldstone. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, (**239**) :267, 1957.

[62] H.P. Kelly. *Phys. Rev.*, (**131**) :684, 1963.

[63] H.P. Kelly and A.M. Sessler. *Phys. Rev.*, (**132**) :2091, 1963.

[64] H.P. Kelly. *Phys. Rev.*, (**134**) :A1450, 1964.

[65] H.P. Kelly. *Phys. Rev.*, (**136**) :B896, 1964.

[66] E.E. Salpeter and H.A. Bethe. *Phys. Rev.*, (**54**) :1232, 1951.

[67] B. Swirles. *Proc. R. Soc. A*, (**152**) :625, 1935.

[68] B. Swirles. *Ibid.*, (**157**) :680, 1935.

[69] C.E. Brown and D.E. Ravenhall. *Ibid.*, (**208**) :552, 1951.

[70] G. Breit. *Phys. Rev.*, (**4**) :553, 1929.

[71] A.I. Akhiezer and V.B. Berestetskii. *Quantum Electrodynamics.* Ed. Willey and Sons, 1965. p. 517-522.

[72] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, (**5**) :2395, 1972.

[73] J. Sucher. *Phys. Rev. A*, (**22**) :348, 1980.

[74] J.P. Desclaux. *Computer Phys. Commun.*, (**9**) :31, 1975.

[75] I.P. Grant. *Phys. Scr*, (**21**) :443, 1980.

[76] W.R. Johnson and J. Sapirstein. *Phys. Rev. Lett.*, (**57**) :1126, 1986.

[77] W.R. Johnson, S. Blundell, and J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, (**37**) :307, 1988.

[78] W.R. Johnson, S. Blundell, and J. Sapirstein. *Phys. Rev. A*, (**37**) :2764, 1988.

[79] J-L. Heully, I. Lindgren, E. Lindroth, S. Lundqvist, and A.-M. Martensson-Pendrill. *J. Phys. B*, (**19**) :2799, 1986.

[80] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics.* Ed. Springer-Verlag, 1994. p. 93.

[81] C. Itzykson and J.B. Zuber. *Quantum Field Theory.* Ed. McGraw-Hill, 1980. Appendice A-2, p.692.

[82] J.J. Sakurai. *Advanced Quantum Mechanics.* Ed. Addison-Wesley Publishing Company, 1967. p. 122-125.

[83] G. Baym. *Lectures On Quantum Mechanics.* Ed. Perseus Books, 1990. Chap. XXIII, p.566.

[84] J.P. Desclaux. In R. Marrus, editor, *Atomic Physic of Highly Ionised Atoms*, volume B96 of *NATO ASI Series*, page 75, 1982.

[85] P. J. Mohr. *Ann. Phys. (N.Y.)*, (**88**) :26, 1974.

[86] P. J. Mohr. *Ann. Phys. (N.Y.)*, (**88**) :52, 1974.

[87] W. Pauli and F. Villars. *Reviews of Modern Physics*, (**21**) :434, 1949.

[88] W.H. Furry. *Phys. Rev.*, (**51**) :125, 1937.

[89] G. Källen and A. Sabry. *Mat. Fys. Meddr. Dansk Vid. Selsk.*, (**29**), 1955. Article n°17.

[90] T. Beier and G. Soff. *Z. Phys. D*, (**8**) :129, 1987.

[91] O. Gorceix, P. Indelicato, and J.P. Desclaux. *J. Phys. B : At. Mol. Phys.*, (**20**) :639–649, 1987.

[92] G.E. Breit. *Phys. Rev.*, (**34**) :553, 1929.

[93] G. Feynberg and J. Sucher. *Phys. Rev. Lett.*, (**26**) :681, 1971.

[94] M. H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, (**4**) :893, 1971.

[95] J. Sucher. *Rep. Prog. Phys.*, (**41**) :1781, 1978.

[96] W. Greiner. *Field Quantization.* Ed. Springer-Verlag, 1996. Chap. III.

[97] J-L. Heully, I. Lindgren, E. Lindroth, and A.-M. Martensson-Pendrill. *Phys. Rev. A*, (**33**) :4426, 1986.

[98] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. A*, (**24**) :1167, 1981.

[99] P. Indelicato and J.P. Desclaux. *Phys. Scr.*, (**46**) :119, 1993.

[100] P. Indelicato. *Phys. Rev. A*, (**51**) :1132, 1995.

[101] J. Hata and I.P. Grant. *J. Phys. B : At. Mol. Phys.*, (**17**) :L107, 1984.

[102] O. Gorceix and P. Indelicato. *Phys. Rev. A*, (**37**) :1087, 1988.

[103] E. Lindroth and A.-M. Martensson-Pendrill. *Phys. Rev. A*, (**39**) :3794, 1989.

[104] S. Love. *Ann. Phys. (N.Y.)*, (**113**) :153, 1978.

[105] J. Sucher. *J. Phys. B*, (**21**) :L585, 1988.

[106] I. Lindgren. *J. Phys. B*, (**23**) :1085, 1990.

[107] P.-0. Lödwin. *Phys. Rev.*, (**97**) :1490, 1955.

[108] J.C. Slater. *Quantum Theory of Atomic Structure.* Ed. MacGraw-Hill, New-York, 1960. Volumes I et II.

[109] I.P. Grant. *Adv. Phys.*, (**19**) :747, 1970.

[110] R.D. Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spectra.* Berkley, CA : University of California Press, 1981.

[111] N. Bessis, G. Bessis, and J.P. Desclaux. *Journal de Physique*, (**31**) :c4–231, 1970.

[112] J.P. Desclaux. In E. Clementi, editor, *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, volume A of *METTEC*, 1993.

[113] P. Indelicato, J.P. Desclaux, and Y.-K. Kim. communication privée.

[114] N.E. Small-Warren and L.-Y. Chox Chiu. *Phys. Rev. A*, (**6**) :1777, 1975.

[115] H. Katori and F. Shimizu. *Phys. Rev. Lett.*, (**23**) :3545, 1993.

[116] M. Walhout, A. Whitte, and S.L. Rolston. *Phys. Rev. Lett.*, (**18**) :2843, 1994.

[117] G. Birkl and al. communication privée.

[118] M. Walhout and al. communication privée.

[119] J.P. Santos, F. Parente, and P. Indelicato. *Eur. Phys. J. D*, (**3**) :43, 1998.

[120] C.T. Munger et H. Gould. *Phys. Rev. Lett.*, (**57**) :2927, 1986.

[121] S.P. Goldman and G.W.F. Drake. *Phys. Rev. A*, (**24**) :183, 1981.

[122] D.F. Anagnostopoulos and al. volume 570 of *LECTURES NOTES IN PHYSICS*, page 500. 2001.

[123] P. Indelicato and L.M. Simons. In G. Cantatore, editor, *Quantum Electrodynamics and Physics of the Vacuum*, volume 564 of *AIP Conference proceedings*, pages 152–157. American Institute of Physics, 2001.

[124] B. Jeckelmann and al. *Nuclear Physics A*, (**457**) :709, 1986.

[125] B. Jeckelmann and al. *Physics Letters B*, (**335**) :326, 1994.

[126] S. Lenz and al. *Physics Letters B*, (**416**) :50, 1998.

[127] D.F. Anagnostopoulos and al. *ACTA PHYSICA POLONICA B*, (**31**) :2219, 2000.

[128] G. L. Borchert, B. Manil, D. Anagnostopoulos, J. P. Egger, D. Gotta, M. Hennebach, P. Indelicato, Y. W. Liu, N. Nelms, and L. M. Simons. *Hyperfine Interaction*, (**132**) :195–207, 2001.

[129] D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev, and V.K. Khersonskii. *Quantum Theory of Angular Momentum.* World Scientific, 1988. p. 147.

[130] S.M. Bilenky. *arXiv :hep-ph*/0203247, 2002.

[131] K. Assanagan et al. *Phys. Lett. B*, (**335**) :231, 1994.

[132] Particle Data Group. *Phys. Rev. D*, (**45**), 1994.

[133] M. Maul et al. *Phys. Rev. A*, (**6**) :3915, 1996.