



HAL
open science

QED dans les ions à un et deux électrons : états très excités ou quasi-dégénérés

Eric-Olivier Le Bigot

► **To cite this version:**

Eric-Olivier Le Bigot. QED dans les ions à un et deux électrons : états très excités ou quasi-dégénérés. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2001. Français. NNT: . tel-00006418v1

HAL Id: tel-00006418

<https://theses.hal.science/tel-00006418v1>

Submitted on 8 Jul 2004 (v1), last revised 2 Feb 2006 (v2)

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.

Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)
et
École Normale Supérieure
Laboratoire KASTLER–BROSSEL



Thèse de doctorat de l'Université Paris VI
spécialité : physique quantique

présentée par
Éric-Olivier LE BIGOT

pour obtenir le grade de Docteur
de l'Université Paris VI

Sujet de la thèse :

**QED dans les ions à un et deux électrons :
états très excités ou quasi-dégénérés**

Soutenue le 26 novembre 2001 devant le jury composé de :

M. Christian BROUDER	Examineur
M. Alain COMTET	Président du jury
M. Jean-Paul DESCLAUX	Rapporteur
M. Paul INDELICATO	Directeur de thèse
M. Ingvar LINDGREN	Rapporteur
M. Fernand SPIEGELMANN	Examineur

Remerciements

Le travail présenté ici est né de projets de Paul Indelicato, qui a dirigé mes recherches avec une grande disponibilité tout au long des trois dernières années. Je le remercie pour les connaissances qu'il m'a fait partager — parfois dans un domaine où il est le seul en France à travailler —, pour la flexibilité qu'il a accordé à mes horaires chahutés par la naissance de mon petit Evan et par les nombreuses heures d'enseignements divers. Son soutien matériel sans faille m'a aussi procuré de très bonnes conditions de recherche.

Ces très bonnes conditions de travail ont aussi été rendues possibles par la présence successive à la tête du laboratoire de Michèle Leduc, Élisabeth Giacobino et Franck Laloë. Je remercie tout particulièrement Franck pour son enthousiasme communicatif et les projets d'intérêt général auxquels il m'a permis de participer.

Le travail que j'ai accompli repose sur celui de nombreuses personnes — à commencer par celui de Paul Indelicato — sans lesquelles il serait resté à un état embryonnaire. Le premier thème de ce mémoire repose sur les travaux fondateurs de Vladimir M. Shabaev, que je remercie pour les nombreuses discussions éclairantes que nous avons eues. Pour le second thème, j'ai bénéficié de code Fortran développé par Paul Indelicato, Peter J. Mohr et Yong-Ki Kim ; je remercie sincèrement Ulrich Jenstschura pour la fructueuse collaboration que nous avons montée, en espérant qu'elle se poursuive par d'autres succès.

Mes chaleureux remerciements vont aussi bien sûr aux membres du jury, Christian Brouder, Alain Comtet, Jean-Paul Desclaux, Ingvar Lindgren et Fernand Spiegelmann, pour l'intérêt qu'ils ont porté au sujet dont il est question ici et pour les heures d'un temps précieux qu'ils ont consacrées à ce manuscrit. Je suis tout particulièrement reconnaissant envers Ingvar Lindgren, qui a entrepris de lire ce texte écrit en langue étrangère. Je remercie aussi les membres du jury pour les nombreuses remarques, critiques et suggestions dont ils m'ont fait bénéficier.

Contre tous mes espoirs, la loi de Hofstadter a encore frappé : *tout prend toujours plus de temps que prévu, même en tenant compte de la loi de Hofstadter*. Je remercie le groupe de Physique Atomique de l'Université Chalmers à Göteborg, Ingvar Lindgren, Sten Salomonson, Ann-Marie

REMERCIEMENTS

Mårtensson-Pendril et Björn Åsén pour la gentillesse et la compréhension dont j'ai bénéficié durant la rédaction des dernières pages de ce mémoire.

Effectuer les démarches administratives et les tâches d'impression de ce manuscrit sous d'autres latitudes que celle de Paris n'aurait pas été possible sans l'aide irremplaçable de Bruno Manil et de Sung-Hwan (Sein) Lee, auxquels j'exprime ici toute ma gratitude. Bruno n'a jamais hésité à m'offrir son aide à des moments critiques et je l'en remercie tout particulièrement.

Le secrétariat du laboratoire est un modèle du genre, où l'on bénéficie de la serviabilité, de la compétence et du sourire de tous ceux qui y travaillent. Je remercie Monique Bonnamy, Karine Gauthier, Christelle Sansa, Karima Noura et Karine Vasseur pour l'avoir fait si bien fonctionner.

Je n'aurais pu effectuer de recherche dans de bonnes conditions sans un enseignement de monitorat agréable — ou sans enseignement tout court. Je remercie pour leur gentillesse et leur accueil chaleureux Michel Massot et son équipe au service des travaux pratiques d'optique de Paris VI, Claude Aslangul, du Laboratoire de Physique des Solides, et Marie-Françoise Quinton, responsable des travaux pratiques de DEUG.

La vie du laboratoire est rythmée par les deux séances de consommation de dopants que sont les ingestions de caféine du midi et de théine à l'heure anglaise. Je remercie tous leurs participants réguliers ou de passage pour la bonne humeur qui y a si souvent régné. Pour les nommer en commençant par les thésitifs et post-docs : Thibaut Jonckherre, Nicolas Treps, Sylvain Gigan, Sara Ducci, Laurent Longchambon, Augustin Baas, Isabelle Maurin, Gaëtan Hagel, Bruno Manil, Gustavo Rodrigues, Marcello Martinielli, Laurent Vernac, Jean-Philippe Karr, Rémi Battesti, Gaëtan Messin, Vincent Josse, Cyriaque Genêt, Kuanshou Zhang et Matthias Vaupel. Puis les membres permanents, qui ont si souvent montré une grande disponibilité : François Biraben, Lucile Julien, Serge Reynaud, Benoit Grémaud, Antoine Heidmann, Claude Fabre, Agnès Maître, Thomas Coudreau, Pierre-François Cohadon, Jean-Pierre Hermier, François Nez, Jean-Michel Courty, Michel Pinard, Laurent Hilico, Corinne Poisson, Astrid Lambrecht, Catherine Schwob, Nicolas Billy, Dominique Delande, Bernard Cagnac, Jean-Pierre Faroux, Saïda Guelatti et Jean-Pierre Descoubes. Nombreux sont les souvenirs qui me reviennent en écrivant ces noms qui demanderaient bien plus que d'être listés.

Merci aussi à mes parents et à mon épouse Jane pour leur aide et leur soutien durant le long travail d'écriture de ce mémoire.

Table des matières

Remerciements	i
Table des matières	iii
I Introduction	1
I/1 Présentation de la thèse	3
I/1.1 Cadre de la thèse	3
I/1.2 Contenu du manuscrit	5
I/1.3 Applications	6
I/1.4 Plan de l'introduction	9
I/2 De la spectroscopie à QED : avant 1950	10
I/2.1 Prédiction des spectres	10
I/2.2 Mécanique quantique	11
I/2.3 Théorie quantique des champs	11
I/3 Expériences sur les systèmes simples	13
I/3.1 Préparation des ions très chargés	14
I/3.1-a Production des ions très chargés	14
I/3.1-b Anneaux de stockage	15
I/3.2 Méthodes spectroscopiques	16
I/3.2-a Hydrogène atomique	16
I/3.2-b Hélium	18
I/3.2-c Ions très chargés	20
I/3.3 Systèmes simples exotiques	21
I/4 De QED aux niveaux atomiques	21
I/4.1 Relativité et QED	21
I/4.2 Calculs perturbatifs contre non perturbatifs	24
I/4.3 Systèmes faiblement liés	24
I/4.3-a Hydrogène et hydrogénoïdes peu chargés	25
I/4.3-b Hélium	26
I/4.4 Approche non perturbative	27
I/4.4-a Principe	27
I/4.4-b Hydrogène et hydrogénoïdes	28
I/4.4-c Hélium et héliumoïdes	29
I/4.4-d Lithiumoïdes	31

TABLE DES MATIÈRES

I/4.4-e	Difficultés des calculs non perturbatifs	32
I/4.4-f	Autres contributions aux niveaux atomiques	32
I/5	Conclusion	35
I/5.1	Expériences	35
I/5.2	Théorie	35
I/5.2-a	Hélium et héliumoides	35
I/5.2-b	Hydrogène et hydrogénoïdes	36
I/5.3	Bases théoriques et conventions	37
II	De QED aux atomes	39
II/1	L'électrodynamique quantique des états liés	40
II/1.1	Présentation	40
II/1.2	QED	41
II/1.2-a	Équation de Dirac (I)	42
II/1.2-b	Espace des états	44
II/1.2-c	Le champ quantique électronique	46
II/1.2-d	Le champ quantique de photons	49
II/1.2-e	Le hamiltonien de l'électrodynamique...	49
II/1.3	Les atomes selon QED	52
II/1.3-a	Introduction	52
II/1.3-b	Hamiltonien en représentation de Schrödinger	53
II/1.3-c	Atomes et électrons selon QED	55
II/2	Niveaux atomiques par QED	57
II/2.1	La méthode de Gell-Mann–Low–Sucher	58
II/2.2	La méthode de l'opérateur d'évolution covariant	59
II/2.3	La méthode de la fonction de Green à deux temps	60
III	Niveaux atomiques par la fonction de Green à deux temps...	63
III/1	Présentation	65
III/2	La fonctions de Green en énergie	65
III/2.1	Propagateur ou fonction de Green à deux temps	66
III/2.2	Fonction de Green en énergie	69
III/2.3	Structure analytique de la fonction de Green	71
III/2.3-a	Développement en temps du propagateur	72
III/2.3-b	Structure formelle	74
III/2.3-c	Structure analytique	77
III/2.4	De la fonction de Green aux énergies atomiques	80
III/3	Calcul perturbatif du propagateur à N particules	83
III/3.1	Développement du propagateur	83
III/3.2	Opérateur chronologique	84
III/3.3	Théorème de Wick	85
III/4	Le hamiltonien effectif	89
III/4.1	Éléments de matrice de la fonction de Green	89
III/4.1-a	Principe de la restriction de la fonction de Green	89

III/4.1-b	Restriction dans le cas non perturbé	89
III/4.1-c	Restriction dans le cas avec interaction	93
III/4.2	Hamiltonien effectif	94
III/4.2-a	Définition du hamiltonien effectif	95
III/4.2-b	Construction du hamiltonien effectif	96
III/5	Règles de Feynman	102
III/5.1	Développement perturbatif du hamiltonien	102
III/5.2	Règles de Feynman	104
III/5.2-a	Plan	104
III/5.2-b	Introduction	104
III/5.2-c	Liste des processus physiques	105
III/5.2-d	Tables des règles de Feynman	108
III/5.2-e	Exemple : la self énergie écrantée	113
III/6	Conclusion : des difficultés subsistent	116
IV	Méthode de la particule fantôme	119
IV/1	Introduction	120
IV/1.1	Présentation	120
IV/1.2	Notations	121
IV/2	Calcul perturbatif de fonctions singulières	122
IV/2.1	Perturbations et contours	122
IV/2.2	Résultats obtenus	125
IV/2.2-a	Pôles et perturbations	125
IV/2.2-b	Intégrales de contour et perturbations	127
IV/2.3	Application à la fonction de Green à deux temps	128
IV/2.4	Conclusion	130
IV/3	Méthode de la particule fantôme	131
IV/3.1	Introduction	131
IV/3.2	Principe de la méthode	131
IV/3.3	Résultats fondamentaux	133
IV/3.3-a	Exemple de la self énergie écrantée	133
IV/3.3-b	Détermination des pôles	134
IV/3.3-c	Extraction des pôles	140
IV/3.3-d	Représentation graphique des calculs	146
IV/3.3-e	Propriétés analytiques et particule fantôme	150
IV/4	Conclusion	155
V	Exemple de contribution au hamiltonien effectif...	157
V/1	Présentation des calculs	159
V/1.1	Présentation	159
V/1.2	Diagrammes considérés	161
V/1.3	Étapes du calcul	162
V/2	Hamiltonien au second ordre	163

TABLE DES MATIÈRES

V/2.1	Simplification du hamiltonien pour un niveau isolé	163
V/2.2	Simplification du hamiltonien au second ordre	164
V/2.2-a	Matrice $K^{(0)}$	164
V/2.2-b	Contribution des diagrammes à deux photons	164
V/2.2-c	Notations pour les intégrations	165
V/2.2-d	Contribution des diagrammes à un photon	166
V/2.2-e	Hamiltonien au second ordre	167
V/2.3	Intégrales de contour	168
V/2.3-a	Intégration pour un diagramme spécifique	168
V/2.3-b	Intégrales de diagrammes à deux photons	168
V/2.3-c	Intégrales de diagrammes à un photon	169
V/2.3-d	Conclusion	170
V/3	Intégrations entre états non dégénérés	171
V/3.1	Introduction et notations	171
V/3.1-a	Énergies différentes	171
V/3.1-b	Notation pour les éléments de matrice	171
V/3.1-c	Groupes de contours	172
V/3.1-d	Organisation des calculs	173
V/3.2	Échange de photon	173
V/3.2-a	Lecture des singularités	173
V/3.2-b	Extraction des pôles	174
V/3.2-c	Contributions au hamiltonien effectif	175
V/3.3	Self énergie	176
V/3.3-a	Règles de sélection	176
V/3.3-b	Choix de niveaux quasi-dégénérés	177
V/3.3-c	Application au hamiltonien effectif	178
V/3.4	Vertex	178
V/3.4-a	Lecture des pôles	178
V/3.4-b	Extraction des pôles	179
V/3.4-c	Contributions au hamiltonien effectif	179
V/3.5	Self énergie écrantée	180
V/3.5-a	Diagrammes réductibles et irréductibles	180
V/3.5-b	Contribution irréductible	181
V/3.5-c	Contribution réductible	184
V/3.6	Conclusion	188
V/4	Intégrations entre états quelconques	189
V/4.1	Introduction	189
V/4.1-a	Limite formelle	189
V/4.1-b	Particule fantôme et divergences	190
V/4.1-c	Plan	190
V/4.2	Échange de photon	191
V/4.3	Self énergie	193
V/4.3-a	Structure analytique	194
V/4.3-b	Contributions au hamiltonien effectif	195

V/4.3-c Conclusion	196
V/4.4 Vertex	196
V/4.5 Self énergie écrantée	196
V/4.5-a Contribution irréductible	197
V/4.5-b Contribution réductible	197
V/5 Contribution de la self énergie écrantée...	201
V/5.1 Résultats graphiques finals	201
V/5.1-a Diagrammes à deux photons	201
V/5.1-b Diagrammes à un photon	202
V/5.2 Résultats pour les diagrammes à un photon	203
V/5.2-a Opérateurs élémentaires	204
V/5.2-b Diagrammes sans particule fantôme	205
V/5.2-c Diagrammes avec particule fantôme	207
V/5.2-d Expression mathématique	208
V/5.2-e Énergies virtuelles fixées	209
V/5.2-f Résultat final	212
V/5.3 Résultats pour les diagrammes à deux photons	213
V/5.3-a Diagrammes sans particule fantôme	213
V/5.3-b Expression mathématique	214
V/6 Conclusion	217
V/6.1 Ensemble des résultats	217
V/6.2 Perspectives	218
VI Calculs de self énergie	221
VI/1 Introduction	222
VI/1.1 Contenu du chapitre	222
VI/1.2 Motivations	222
VI/2 Cadre théorique	224
VI/2.1 Équation de Dirac (II)	224
VI/2.2 Formule de principe	225
VI/2.3 Méthodes numériques utilisées	227
VI/2.4 Quantités calculées	228
VI/3 Résultats sur la self énergie	231
VI/3.1 Résultats numériques	231
VI/3.1-a Principe des évaluations numériques	231
VI/3.1-b Niveaux étudiés	232
VI/3.1-c Déplacements numériques	233
VI/3.2 Résultats analytiques	238
VI/3.2-a Description du problème	239
VI/3.2-b Formules finales	240
VI/4 Calcul des coefficients angulaires	244
VI/4.1 Calcul analytique	244
VI/4.1-a Principe et difficultés des dérivations	244

TABLE DES MATIÈRES

VI/4.1-b	Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$	244
VI/4.1-c	Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$	248
VI/4.2	Optimisation analytique des coefficients	252
VI/5	Conclusion	255
VII	Conclusion	257
A	Dérivation des règles de Feynman	261
A/1	Introduction	261
A/1.1	Motivations	261
A/1.2	Plan de l'appendice	262
A/2	Dérivation de plusieurs règles	262
A/2.1	Du diagramme au propagateur	263
A/2.2	Du propagateur à la fonction de Green	266
A/3	Conclusion	269
B	Singularités et perturbations : preuve du théorème	271
B/1	Position du problème	271
B/2	Structure analytique perturbative	272
B/3	Intégrations de contour et perturbations	274
B/4	Conclusion	276
C	Étude des propriétés analytiques des diagrammes	279
C/1	Introduction	279
C/2	Fonctions à étudier	280
C/2.1	Fonction de Green sans propagateur fantôme	280
C/2.2	Fonctions de Green avec propagateurs fantômes	282
C/3	Forme commune aux propagateurs élémentaires	283
C/4	Choix d'un ordonnancement temporel et d'états propres	285
C/5	Propriétés analytiques	287
C/6	Conclusion	289
D	Self énergie : résultats numériques	291
D/1	Présentation des résultats	291
D/2	Self énergies numériques par niveau atomique	295
D/3	Contributions numériques détaillées	317
	Bibliographie	339
	Index	365

CHAPITRE I

Introduction

Sommaire

I/1	Présentation de la thèse	3
I/1.1	Cadre de la thèse	3
I/1.2	Contenu du manuscrit	5
I/1.3	Applications	6
I/1.4	Plan de l'introduction	9
I/2	De la spectroscopie à QED : avant 1950	10
I/2.1	Prédiction des spectres	10
I/2.2	Mécanique quantique	11
I/2.3	Théorie quantique des champs	11
I/3	Expériences sur les systèmes simples	13
I/3.1	Préparation des ions très chargés	14
I/3.1-a	Production des ions très chargés	14
I/3.1-b	Anneaux de stockage	15
I/3.2	Méthodes spectroscopiques	16
I/3.2-a	Hydrogène atomique	16
I/3.2-b	Hélium	18
I/3.2-c	Ions très chargés	20
I/3.3	Systèmes simples exotiques	21
I/4	De QED aux niveaux atomiques	21
I/4.1	Relativité et QED	21
I/4.2	Calculs perturbatifs contre non perturbatifs	24
I/4.3	Systèmes faiblement liés	24
I/4.3-a	Hydrogène et hydrogénoïdes peu chargés	25
I/4.3-b	Hélium	26
I/4.4	Approche non perturbative...	27
I/4.4-a	Principe	27
I/4.4-b	Hydrogène et hydrogénoïdes	28
I/4.4-c	Hélium et héliumoïdes	29
I/4.4-d	Lithiumoïdes	31
I/4.4-e	Difficultés des calculs non perturbatifs	32
I/4.4-f	Autres contributions aux niveaux atomiques	32
I/5	Conclusion	35

CHAPITRE I. INTRODUCTION

I/5.1	Expériences	35
I/5.2	Théorie	35
I/5.2-a	Hélium et héliumoides	35
I/5.2-b	Hydrogène et hydrogénéoides	36
I/5.3	Bases théoriques et conventions	37

Présentation de la thèse

I/1.1

Cadre de la thèse

.....
 Systèmes
 atomiques
 simples

Le travail de thèse présenté ici s'inscrit dans le domaine des atomes et ions à faible nombre d'électrons (hydrogène, hélium, ions hydrogénéoïdes ou héliumoïdes, ...). Ces systèmes simples sont particulièrement adaptés à des études expérimentales et théoriques extrêmement précises [KARSHENBOIM *et al.* 2001 ; BEYER and SHEVELKO 1999 ; LIESEN 1995 ; JOHNSON *et al.* 1988 ; MARRUS 1983 ; HANLE and KLEINPOPPEN 1978].

.....
 QED

Les études théoriques les plus précises des niveaux d'énergie de ces systèmes requièrent l'usage de l'*électrodynamique quantique* ou « *QED* » (« quantum electrodynamics », théorie électromagnétique [PESKIN and SCHROEDER 1995 ; WEINBERG 1995] du « modèle standard » des interactions fondamentales [GAILLARD *et al.* 1999 ; DONOGHUE *et al.* 1992]). Bien que cette théorie soit loin d'être nécessaire à tous les domaines de la physique atomique, elle est *indispensable* [SAPIRSTEIN 1985] à l'interprétation de certains résultats expérimentaux, comme par exemple le déplacement de Lamb entre les niveaux¹ $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'hydrogène [LAMB and RETHERFORD 1947] ou bien les énergies de transition observées dans les ions lourds très ionisés² (voir par exemple BEYER and SHEVELKO [1999]). La figure I.1 montre une comparaison entre les niveaux d'énergie de l'hydrogène atomique et de l'uranium hydrogénéoïde U^{91+} tels qu'ils sont mesurés expérimentalement et tels qu'ils sont prédits par le modèle de Bohr (ou encore l'équation de Schrödinger), la théorie de Dirac et QED, qui est la seule à donner correctement ces niveaux.

Cette thèse est ainsi fondée entièrement sur l'électrodynamique quantique (« des états liés » — *cf.* section II/1), qui inclut la relativité restreinte et la seconde quantification. Nous rappelons les bases de cette théorie dans le chapitre II.

¹Nous rappelons dans la section VI/2.1 la notation standard que nous utilisons ici pour décrire les niveaux de l'hydrogène atomique. Nous notons les niveaux par nL_j , où n est le nombre quantique principal de l'électron, L le moment cinétique orbital (de sa grande composante, *cf.* section VI/2.1) et j son moment cinétique total (incluant le spin). Nous utiliserons indifféremment une lettre minuscule ou majuscule pour le moment cinétique orbital (les états propres de l'équation de Dirac sont cependant toujours notés avec une minuscule).

²Par exemple, la contribution de QED à l'énergie du niveau fondamental de l'uranium atteint presque 500 eV [STÖHLKER *et al.* 2000 ; MOHR *et al.* 1998], soit plus de 30 fois l'énergie d'ionisation de l'hydrogène atomique.

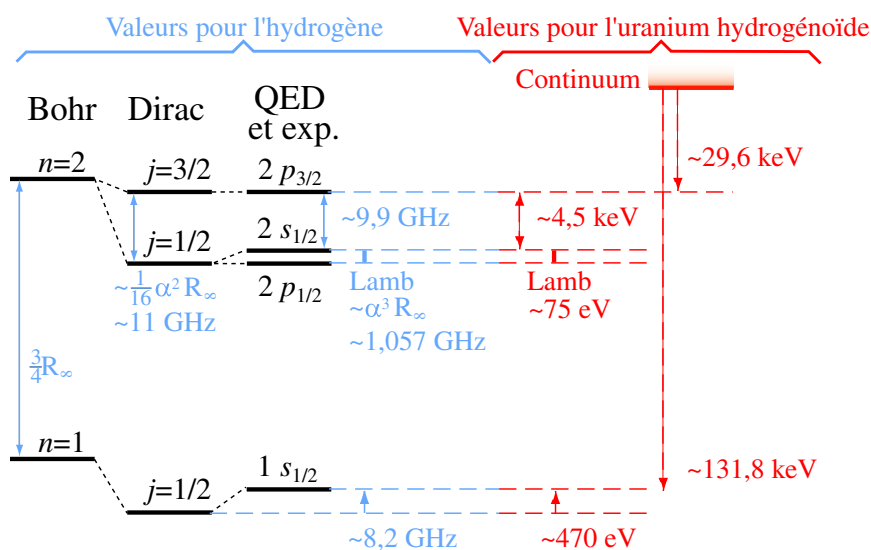


FIG. I.1 – Niveaux d'énergie dans l'hydrogène et dans l'uranium hydrogénoïde. L'électrodynamique quantique (QED) — théorie relativiste de l'interaction électromagnétique quantifiée — doit être utilisée pour prédire les niveaux d'énergie observés dans l'hydrogène (en bleu) et dans l'uranium hydrogénoïde U^{91+} (en rouge). Les théories de Bohr (non relativiste) et de Dirac (relativiste, mais ne traitant pas la lumière sous forme de photons) ne prédisent qu'approximativement ces niveaux. Nous avons négligé ici la structure hyperfine. (R_∞ désigne le Rydberg.)

Contenu du manuscrit

Ce mémoire concerne la prédiction des niveaux atomiques par QED. Pour prédire numériquement ces niveaux, il est d'abord nécessaire d'obtenir des formules mathématiques se prêtant à des calculs numériques de leurs énergies. Dans un deuxième temps, il faut obtenir les résultats chiffrés nécessaires aux comparaisons avec l'expérience. Le travail présenté ici couvre successivement ces deux étapes : les chapitres III–V rentrent dans le cadre de la première étape et le chapitre VI dans celui de la seconde. L'index fourni à la fin de ce mémoire est destiné à faciliter la lecture du manuscrit.

Fonction de
Green à
deux temps

Nous faisons le point dans le chapitre III sur l'une des quelques méthodes destinées (entre autres [SHABAEV 1994]) à exprimer mathématiquement les prédictions de QED pour les niveaux atomiques : la méthode dite « de la fonction de Green à deux temps », proposée récemment [SHABAEV 1988b, 1993]. Celle-ci possède des avantages que nous décrivons dans la section II/2.3 — et qui incluent en particulier la possibilité d'obtenir perturbativement des expressions formelles (exploitables numériquement) pour *n'importe quel* ensemble d'énergies atomiques, alors que les méthodes plus anciennes sont restreintes à la prédiction de niveaux *isolés*. Ma présentation du chapitre III reprend les articles publiés sur la méthode de la fonction de Green à deux temps mais y ajoute des explications et de nombreux détails qui manquent aux présentations originales.

Nous verrons que les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps laissent en suspens un certain nombre de questions : certaines difficultés théoriques n'y sont pas soulevées (*cf.* section III/6), et l'application de la méthode à des calculs concrets semble toujours y suivre des dérivations *ad hoc*. Je me suis attaché à ces deux problèmes — qui empêchent tout¹ usage rigoureux et systématique de la méthode. Je résous la première difficulté dans la section IV/2, où je complète les résultats publiés par des *justifications* théoriques qui valident la méthode. D'autre part, je développe dans la section IV/3 une méthode *systématique* permettant d'utiliser relativement aisément la théorie présentée dans le chapitre III : la méthode « de la particule fantôme » que j'y introduis permet de dériver graphiquement des expressions théoriques simples des niveaux atomiques prédits par QED. Comme exemple d'application, je calcule dans le chapitre V la contribution aux niveaux d'énergie de l'une des plus importantes corrections de QED à l'interaction entre électrons dans les héliumoides (atomes et ions à deux électrons) : la « self énergie écrantée » (*cf.* section V/1.2).

¹La méthode de la fonction de Green à deux temps n'a apparemment été employée en physique atomique que par SHABAEV [1988b, 1990a] (qui l'y a introduite) et ses élèves [ARTEMYEV *et al.* 2000 ; YEROKHIN *et al.* 2000].

.....
Calculs
numériques

Les formules mathématiques obtenues par la méthode présentée dans les chapitres III et IV — ou par d'autres méthodes : *cf.* section II/2 — sont trop compliquées pour être évaluées analytiquement. Le chapitre VI montre un exemple de *calcul numérique* de correction de QED aux niveaux atomiques : j'y présente nos calculs de précision¹ de la contribution la plus importante de QED aux niveaux d'énergie des atomes et ions hydrogénoïdes, la « self énergie » (que l'on peut concevoir comme l'action de l'électron sur lui-même par émission et absorption d'un photon — *cf.* chapitre VI).

Applications

.....
Métrologie
et tests de
théories

Les calculs et les mesures sur les systèmes atomiques simples ont atteint des incertitudes numériques tellement faibles que les comparaisons entre théorie et expérience peuvent servir soit à des mesures extrêmement précises de constantes fondamentales [MOHR and TAYLOR 2000, 2001], soit à des tests détaillés des théories employées — qu'elles soient incluses dans le « modèle standard » des interactions fondamentales (QED, mais aussi QCD — *Quantum Chromodynamics* —, théorie de l'interaction forte) ou non [BLUHM 2001]. Ainsi, par exemple, la prédiction théorique — disons d'une énergie de transition atomique — la plus précise à un moment donné contraint fortement certaines constantes fondamentales, par comparaison avec les expériences; ce résultat théorique ne peut donc servir à tester la théorie qui a servi le produire puisque l'ajustement des constantes fondamentales² est fait pour le rendre juste [HILL *et al.* 1989]. Mais par sa contribution à la métrologie, il permet des comparaisons encore plus probantes entre d'autres prédictions théoriques et les expériences³.

¹Le code que j'ai utilisé a été écrit pour l'essentiel par Peter Mohr et Paul Indelicato [MOHR 1974a ; INDELICATO and MOHR 1992, 1998b, 2001], avec plusieurs routines de Yong-Ki Kim [MOHR and KIM 1992].

²Plus de détails sur la procédure d'ajustement utilisée par le *Committee on Data for Science and Technology* (CODATA) pour la publication de leurs recommandations pour la valeur des constantes fondamentales peuvent être trouvés dans MOHR and TAYLOR [2000].

³Par exemple, la détermination actuellement la plus précise de la constante de structure fine α (réalisée par mesure du rapport gyromagnétique de l'électron — *cf.* KINOSHITA [2001] ; HUGHES and KINOSHITA [1999]) influence beaucoup la valeur et l'incertitude acceptées pour cette constante [MOHR and TAYLOR 2000, 2001]. La théorie qui a servi à déduire la valeur de α des mesures sur le facteur gyromagnétique (g) peut être remise en question si l'estimation qui en a été récemment obtenue (grâce à des mesures de la structure fine de l'hélium [GEORGE *et al.* 2001]) propose une valeur contradictoire suffisamment précise — il est attendu que l'expérience décrite dans GEORGE *et al.* [2001] fournisse bientôt la deuxième plus précise valeur de la constante de structure fine α .

Expériences D'un point de vue expérimental, la quête de précision sur les mesures dans les systèmes simples stimule de nombreux domaines. Nous pouvons par exemple citer les *lasers* [BIRABEN *et al.* 2001 ; NIERING *et al.* 2000 ; DE BEAUVOIR *et al.* 2000] et certaines techniques associées, comme par exemple celle, très récente, des peignes de fréquences¹ [NIERING *et al.* 2000 ; UDEM *et al.* 2001]. Comme les ions très chargés possèdent (par rapport à l'hydrogène) des électrons externes très proches au noyau, les énergies de transition que l'on mesure dans ces systèmes appartiennent au domaine des *rayons X* : les expériences précises de spectroscopie de ces ions très chargés stimulent le domaine des sources de rayons X [BEYER 1995b] — avec les applications qu'on leur connaît en médecine, comme par exemple dans le traitement de certains cancers.

Théories Comme mentionné plus haut, les mesures expérimentales précises d'énergies de transition permettent des tests extrêmement sévères de diverses théories, et en particulier du modèle standard. Par exemple, les étonnants résultats expérimentaux obtenus récemment sur le moment magnétique du muon [BROWN *et al.* 2001] montrent que le « modèle standard » des interactions fondamentales peut être remis en cause par des expériences de précision dans le domaine des *basses énergies*.

En ce qui concerne QED, les atomes et les ions à faible nombre d'électrons sont des systèmes physiques de *basse énergie* : l'énergie de masse des électrons est de l'ordre de leur énergie totale (qui inclut en plus leurs énergies cinétique et électromagnétique). Leur étude permet de tester QED dans un domaine complémentaire de celui des hautes énergies (*i. e.*

¹Sources de lumière dont le spectre large (couvrant presque tout le visible) possède des composantes espacées régulièrement et de façon contrôlable.

des accélérateurs de particules). D'autre part, dans les ions très chargés (comme par exemple l'uranium hydrogénoïde U^{91+} , que l'on sait produire expérimentalement [BRIAND *et al.* 1990]), les électrons subissent un *champ électrique extrêmement intense* pendant un temps quasi-illimité — et donc un fort champ magnétique motionnel (dans leur référentiel propre). Par exemple, la loi de Coulomb donne un champ électrique de $2 \cdot 10^{21}$ V/m à la surface d'un noyau d'uranium¹; cette valeur est à comparer aux $1 \cdot 10^{18}$ V/m du champ *homogène* qui permet de créer spontanément des paires électron-positron selon le mécanisme de Schwinger [SCHWINGER 1954a,b]. Le champ *magnétique* à l'extérieur des noyaux possédant un moment magnétique non nul est aussi très important — comme par exemple le champ d'environ 10^{12} gauss à la surface d'un noyau de $^{209}_{83}\text{Bi}$ [MOHR *et al.* 1998, p. 320]. Prédire les niveaux atomiques dans les ions très chargés permet donc de tester QED dans un domaine qui exhibe des propriétés quantiques remarquables [SOFF and MOHR 1988].

.....
Autres applications

Parmi les autres applications de l'étude des atomes et ions à faible nombre d'électrons, nous pouvons mentionner l'étude de la structure des *couches internes*² des atomes (ou des ions peu chargés) [DESIDERIO and JOHNSON 1971 ; JOHNSON and CHENG 1984], car leurs électrons subissent presque entièrement la charge du noyau. Des calculs récents ont ainsi permis de remonter au déplacement de Lamb³ du niveau $1s$ de plusieurs éléments jusqu'au numéro atomique $Z = 100$ [INDELICATO *et al.* 1998].

D'autre part, l'étude des spectres émis par les ions très chargés peut servir d'outil de diagnostic sur l'état des plasmas [MARRUS 1983] (plasmas créés dans les expériences de fusion nucléaire ou bien observés en astronomie [KAHN and LIEDAHL 1995]).

De plus, l'étude des niveaux d'énergie atomique a atteint des précisions telles que les effets de la taille du noyau sont clairement visibles dans les énergies de transitions mesurées. Ainsi dans les ions lourds, la contribution de la taille finie du noyau à l'énergie du fondamental n'est pas négligeable par rapport à la contribution de QED : ces deux corrections à l'énergie d'ionisation prédite par l'équation de Dirac sont du même ordre de grandeur

¹On obtient cette valeur en prenant 7,42 fm comme rayon d'un noyau d'uranium modélisé par une charge entièrement répartie dans une boule [MOHR *et al.* 1998, p. 230].

²Nous utilisons ici la terminologie du « modèle en couche » des atomes (voir par exemple HAKEN and WOLF [1993] et COHEN-TANNOUJDI *et al.* [1977]).

³Une façon de définir le déplacement de Lamb de tout niveau de l'hydrogène et des hydrogénoïdes consiste à le prendre comme la différence entre l'énergie de liaison expérimentale et la prédiction de cette énergie par l'équation de l'équation de Dirac (*cf.* section II/1.2-a) pour un électron dans le champ d'un noyau ponctuel (et fixe) [MOHR *et al.* 1998, § 9.1]. Les corrections dues à la masse finie du noyau sont connues avec une précision suffisante dans l'hydrogène pour être parfois ajoutées à l'énergie de Dirac et définir un déplacement de Lamb de valeur légèrement différente [BIRABEN *et al.* 2001].

dans l'uranium hydrogénoïde U^{91+} [JOHNSON and SOFF 1985]. L'étude de l'hydrogène permet même de mesurer la taille du proton [BIRABEN *et al.* 2001], en comparant mesures expérimentales et prédictions théoriques des niveaux (*cf.* section I/3.2).

Enfin, les mesures de précision des fréquences de transition dans les systèmes atomiques simples ont atteint des précision tellement remarquables qu'elles commencent à pouvoir être utilisées pour tester des variations dans les constantes fondamentales [WEBB *et al.* 2001 ; KARSHENBOIM 2000 ; DZUBA *et al.* 1999].

I/1.4

Plan de l'introduction

Nous présentons dans la section I/2 un historique rapide des travaux fondateurs du domaine, qui culmine avec la découverte du déplacement de Lamb en 1947 [LAMB and RETHERFORD 1947] et le calcul de son ordre de grandeur par BETHE [1947], qui a montré la pertinence de QED, une fois « renormalisée ».

Ces deux avancées majeures ont fourni les bases de nombre d'études de précision des niveaux atomiques, sur lesquelles nous nous concentrons ensuite. Nous présentons d'une part dans la section I/3 quelques expériences importantes effectuées sur les systèmes simples (hydrogène, hélium, ions lourds hydrogénoïdes et héliumoïdes, en particulier), et d'autre part les principales méthodes théoriques de prédiction des niveaux d'énergie de ces systèmes (section I/4) — ces expériences et ces calculs atteignent parfois des précisions qui sont parmi les plus grandes de la physique.

D'autres grandeurs atomiques, moins étudiées que les fréquences de transition, offrent un intérêt expérimental et théorique particulier par la précision des mesures et des prédictions qu'ils permettent : nous pouvons par exemple citer le facteur de Landé¹ d'un électron *lié* (« *g factor* ») — qui offre la possibilité de mesurer la constante de structure fine α avec une très grande précision [BEIER 2000 ; MOHR and TAYLOR 2000] —, ou bien encore l'étude de probabilités de transition, de forme de raies [SHABAEV 2000, 2002] ou de sections efficaces de recombinaison électronique [SHABAEV 1994]. Le travail présenté dans ce mémoire concerne cependant uniquement le thème — plus souvent étudié, aussi bien expérimentalement que théoriquement — des niveaux d'énergie atomiques.

¹Nous rappelons que le facteur de Landé d'un électron dans un état de moment cinétique total fixé est essentiellement le rapport du moment magnétique sur ce moment cinétique (voir par exemple BEIER [2000] pour le cas d'un électron lié à un noyau).

De la spectroscopie à QED : avant 1950

La physique atomique est à l'origine de nombreux développements de la mécanique quantique et en particulier de la théorie quantique des champs. Nous proposons un rapide survol historique des liens tissés jusqu'en 1950 entre ces domaines, dans lesquels s'inclut le travail présenté dans ce mémoire — en laissant donc de côté les résultats remarquables obtenus dans le domaine des hautes énergies durant les dernières décennies, comme par exemple le « modèle standard » des interactions fondamentales. Nous présentons les résultats obtenus plus récemment dans les sections suivantes. Pour un historique plus approfondi, le lecteur intéressé pourra par exemple se reporter à WHITE [1934], à WEINBERG [1995, Chap. 1] ou à APS [1999].

1/2.1

Prédiction des spectres

Depuis l'obtention des premiers spectres (d'absorption, observés dans la lumière du soleil [WOLLASTON 1802]), un grand effort a été investi dans la classification et l'interprétation des raies observées dans différentes sources de lumière. Une telle étude était d'autant plus intéressante qu'autour de 1860, les observations de Kirchhoff et de Bunsen avaient montré que les spectres optiques étaient caractéristiques des éléments qui émettaient ou absorbaient la lumière [HAKEN and WOLF 1993, p. 3]. Une étape importante a été la découverte (faite par Balmer en 1885) d'une loi simple donnant les longueurs d'onde des 14 raies d'absorption observées dans plusieurs étoiles [WHITE 1934].

Le premier modèle d'atome capable de prédire (sans paramètre libre) la position des raies observées dans l'hydrogène (atomique, produit grâce à des décharges, ou bien au sein des étoiles) est le célèbre modèle dû à BOHR [1913]. Celui-ci a combiné l'idée de quantification introduite par Planck en 1901 avec le modèle d'atome proposé par Rutherford¹ en 1911 à la suite de ses expériences de diffusion de particules alpha [HAKEN and WOLF 1993, p. 3]; ainsi selon Bohr, les électrons orbitent suivant des *cercles* avec un *moment cinétique quantifié* qui conduit à une quantification des énergies atomiques.

Certaines raies spectrales de l'hydrogène atomique prédites par le modèle de Bohr sont en fait composées expérimentalement d'une *série* de raies rapprochées (observées bien avant l'introduction de ce modèle par MICHELSON and MORLEY [1887] : voir SERIES [1989]). Une explication théorique de cette « structure fine » a été proposée par SOMMERFELD [1916],

¹Ce modèle était celui d'un nuage d'électron entourant un centre chargé positivement.

qui a ajouté au modèle de Bohr les trajectoires *elliptiques* classiquement envisageables pour les électrons [WHITE 1934].

1/2.2

Mécanique quantique

Les grandes percées théoriques des années 1920 ont remplacé le modèle de Bohr–Sommerfeld par un cadre plus général, inspiré par l'idée de DE BROGLIE [1924, 1925], qui a proposé d'associer une onde à toute particule. Schrödinger a ainsi présenté dans une série d'articles célèbres [SCHRÖDINGER 1926a,b,c,d] une mécanique *quantique* (parallèlement à HEISENBERG [1925]). Le spectre de l'hydrogène a pu alors être compris de façon moins *ad hoc* que par le modèle de Bohr–Sommerfeld ; même la structure *fine* de l'hydrogène était prédite, grâce à la prise en compte de l'interaction « spin-orbite » [HEISENBERG and JORDAN 1926 ; DARWIN 1927] — entre le champ magnétique vu par l'électron dans son référentiel et le moment magnétique de l'électron (produit par son moment cinétique intrinsèque — le « spin » — suggéré par UHLENBECK and GOUDSMIT [1925, 1926]).

Cependant, en 1927, on ne disposait d'aucune théorie permettant de prédire les niveaux de l'hydrogène atomique et qui incluait *naturellement* la relativité (restreinte) et le spin de l'électron ; l'équation de DIRAC [1926] a rapidement répondu avec succès à ce problème [DARWIN 1928a,b ; GORDON 1928] et a acquis ses lettres de noblesse avec la prédiction des anti-électrons à laquelle elle a finalement conduit [DIRAC 1931] (avant leur observation [ANDERSON 1932, 1933]), ainsi qu'avec celle du facteur de Landé g de l'électron (qui est essentiellement le rapport entre les moment magnétique et cinétique) mesuré peu de temps auparavant [UHLENBECK and GOUDSMIT 1925, 1926]. L'équation de Dirac forme de nos jours la base du traitement relativiste des particules de spin 1/2, puisqu'elle décrit celles-ci dans la situation (hypothétique) où elles ne subissent pas l'interaction avec le champ électromagnétique quantifié du « modèle standard » (voir le chapitre II).

1/2.3

Théorie quantique des champs

Parallèlement à ces développements théoriques motivés par la compréhension des spectres, un autre problème de physique atomique, celui de la prédiction de taux d'émission spontanée, a stimulé la naissance de la notion de *champ quantique* [WEINBERG 1995, p. 17], que nous utiliserons abondamment. Le photon étant la seule particule à avoir d'abord été connue comme un champ, il a le premier¹ été décrit par un champ quantique (champ dont la valeur en un point donné est un opérateur et non un

¹Nous tenons cette information de VAN DER WAERDEN [1968, Sect. 3].

scalaire). Une théorie générale des champs quantiques a ainsi été proposée dès 1929 [HEISENBERG and PAULI 1929, 1930], soit très peu de temps après la naissance de la mécanique quantique.

L'idée à l'origine de ce champ quantique de photons est la suivante [WEINBERG 1995, § 1.2] : chaque mode d'oscillation du champ électromagnétique possède une amplitude qui varie dans le temps de façon semblable à celle des coordonnées d'un oscillateur (harmonique), si bien que l'on peut décider de transformer cette amplitude en un opérateur « coordonnée » satisfaisant avec sa « quantité de mouvement conjuguée » les relations canoniques de commutation de la mécanique quantique, et d'utiliser des opérateurs pour définir un hamiltonien qui gouverne l'évolution de ces modes d'oscillation.

Ensuite, on a aussi associé un champ quantique aux électrons (et positrons) ; cette procédure a fourni une solution élégante au problème des solutions d'énergie *négative* prédites par l'équation de Dirac (voir FOCK [1933], FURRY and OPPENHEIMER [1934] et la section II/1.2-e).

.....
Infinis

Malgré ses avantages, la théorie quantique des champs a *coexisté* un certain temps avec la théorie des trous proposée par Dirac [WEINBERG 1995, p. 19]. La présence d'*infinis* dans les prédictions de la théorie quantique des champs, notée très tôt [HEISENBERG and PAULI 1929, 1930] a contribué dans les années 1930 au manque d'engouement pour cette théorie. Par exemple, l'influence du champ électromagnétique d'un électron sur lui-même se trouvait modifier son énergie d'une quantité infinie [OPPENHEIMER 1930 ; WALLER 1930a,b,c]. Ainsi, dans les années 1930 et 1940, la tendance était plus à la recherche d'*autres* formalismes qu'à l'attaque des problèmes d'*infinis* rencontrés dans la théorie quantique des champs [SCHWINGER 1983].

Malgré tout, une idée potentiellement salvatrice flottait dans l'air des années 1930 [WEINBERG 1995, p. 34] : celle de *renormalisation*. De la même façon qu'une balle que l'on déplace sous l'eau possède du fait de ses interactions avec le milieu liquide une dynamique différente de celle qu'on observe à l'air libre, l'interaction électromagnétique modifie les propriétés d'un électron « nu » (*i. e.* ne subissant pas cette interaction) et contribue aux propriétés de l'électron que l'on peut *observer* ; ainsi, utiliser dans les calculs la masse expérimentale plutôt que la masse « nue » permettrait d'obtenir des quantités finies. Cette idée a été appliquée à l'électron dans un cadre classique par Kramers, qui a présenté ses résultats à la célèbre *Conference on the Foundations of Quantum Mechanics* tenue à Shelter Island en 1947 — et qui a eu la vertu de réunir des expérimentateurs et plusieurs générations de théoriciens. La confirmation¹ à cette conférence du maintenant célèbre écart d'énergie entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'hydrogène

¹L'existence d'un écart entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'hydrogène avait été suspectée près de dix ans auparavant [PASTERNAK 1938 ; HOUSTON 1937 ; WILLIAMS 1938], mais sans confirmation claire [DRINKWATER *et al.* 1940].

[LAMB and RETHERFORD 1947] — en contradiction avec l'élégante théorie de Dirac (*cf.* figure I.1) — a éperonné de façon décisive le développement de la renormalisation et, partant, a contribué au succès de la théorie quantique des champs. En effet, tous les calculs de cet écart avaient jusqu'alors donné un résultat *infini* [BETHE 1947]; mais le célèbre calcul (non relativiste et avec renormalisation) effectué par BETHE [1947] lui a permis d'obtenir une très bonne estimation théorique de l'écart observé. L'extension de la renormalisation à une théorie relativiste a suivi de peu [FRENCH and WEISSKOPF 1949 ; KROLL and LAMB 1949 ; SCHWINGER 1949 ; FEYNMAN 1948c,a,b, 1949b,a, 1950 ; FUKUDA *et al.* 1948a,b] et a donné un excellent accord avec l'expérience de Lamb et Retherford.

Ce succès, combiné à celui du calcul par SCHWINGER [1948] du moment magnétique de l'électron observé peu de temps auparavant [KUSH and FOLEY 1947 ; NAFE *et al.* 1947 ; NAGEL *et al.* 1947] — et différant lui aussi de la prédiction de l'équation de Dirac — a fini par convaincre les physiciens de la pertinence des « corrections radiatives » données par la théorie quantique des champs après renormalisation (influence du champ électromagnétique de l'électron sur lui-même).

.....

Théorie des
champs

Nous devrions en fait parler *des* théories des champs, car plusieurs formalismes coexistaient (voir les articles par Schwinger, Feynman et Tomonaga dans [SCHWINGER 1958]), finalement unifiés par DYSON [1949a,b].

Dans ce mémoire, nous utilisons cette théorie, définie pour l'essentiel il y a cinquante ans. Cependant, son *utilisation* pour la *prédiction des niveaux atomiques* (en particulier dans les ions lourds) ne se fait pas sans difficultés et constitue un sujet de recherche actuel, dans lequel s'inscrit le travail de ce mémoire et que nous présentons dans les deux sections qui suivent, dédiées respectivement aux avancées expérimentales (section I/3) et théoriques (section I/4).

SECTION 3 (Chapitre I)

Expériences sur les systèmes simples

De nombreuses expériences importantes ont mené aux résultats extrêmement précis atteints de nos jours sur les fréquences de transitions dans les atomes simples et les ions à faible nombre d'électrons. Nous donnons dans cette section un aperçu rapide des techniques expérimentales mises en jeu dans de telles études.

Préparation des ions très chargés

1/3.1-a \diamond **Production des ions très chargés**

La première difficulté de l'étude expérimentale des ions très chargés concerne leur *production*. Actuellement, ceux-ci sont obtenus par différentes techniques dont le principe commun est de faire entrer des électrons en collision avec des atomes ou des ions.

.....
Beam-foil spectroscopy

La technique la plus ancienne de production d'ions très chargés [KAY 1963 ; BASHKIN 1964], la « *beam-foil spectroscopy* » (BFS), consiste à bombarder une cible (par exemple de carbone) avec des ions négatifs mis en mouvement par un accélérateur¹ : les ions accélérés perdent des électrons grâce à la répulsion électromagnétique exercée par les couches électroniques des atomes de la cible qu'ils traversent. On peut ainsi produire des ions excités se déplaçant à grande vitesse.

Les applications spectroscopiques de cette méthode de production d'ions très chargés sont facilitées si l'on ralentit les ions produits (afin de minimiser le déplacement Doppler des énergies de transition mesurées), ce qui pose des difficultés techniques supplémentaires [DESLATTES *et al.* 1985 ; BEYER *et al.* 1991]. D'autre part, les accélérateurs employés pour mettre en mouvement les ions sont des machines de grande taille qui demandent des moyens particuliers. Cependant, cette méthode a été très utilisée depuis son introduction et a fourni en particulier les premières données spectroscopiques (et en particulier le déplacement de Lamb) sur les ions très chargés (comme par exemple sur le chlore [WOOD *et al.* 1982] et l'argon² [GOULD and MARRUS 1983] hydrogénoïdes). Elle est toujours employée pour des expériences de spectroscopie [MYERS 2001], et a même permis d'obtenir la mesure la plus précise (incertitude d'environ 3 %) du déplacement de Lamb du fondamental de l'uranium hydrogénoïde [STÖHLKER *et al.* 2000].

.....
lons de recul

Une autre méthode de production d'ion très chargés consiste à envoyer des ions très chargés (comme par exemple U^{45+}) sur une cible (d'argon, par exemple) dont les électrons sont capturés par les ions incidents, et dont les noyaux reculent, avec aucun ou peu d'électrons [DESLATTES *et al.* 1984 ; BEYER *et al.* 1985b]. Cette méthode possède l'avantage d'éliminer en grande partie les incertitudes dues à l'effet Doppler.

¹Les accélérateurs utilisés sont passés du type Van de Graaf [MARTINSON 1983 ; ANDRÄ 1978 ; MARTINSON *et al.* 1977], aux accélérateurs linéaires [BRIAND *et al.* 1983] puis aux synchrotrons [MUNGER and GOULD 1986 ; BRIAND *et al.* 1990]. Des techniques d'accélération puis décélération (pour minimiser l'effet Doppler) sont ensuite apparues [DESLATTES *et al.* 1985 ; BEYER *et al.* 1991].

²La technique expérimentale développée pour l'argon [GOULD and MARRUS 1983] a permis d'étudier un ion aussi chargé que U^{90+} (héliumoïde) [MUNGER and GOULD 1986].

.....

EBIT L'« *Electron Beam Ion Trap* » (EBIT) est une technique plus récente de production d'ions très chargés ; son principe est le symétrique de celui de la *beam-foil spectroscopy* : les ions très chargés sont obtenus en bombardant des atomes avec un faisceau d'électrons (les atomes qui perdent leurs électrons sont quasiment au repos, en particulier grâce au confinement électrostatique créé par le faisceau d'électrons) [LEVINE *et al.* 1989 ; KNAPP 1995].

On sait produire par cette technique des ions aussi chargés que le noyau d'uranium U^{92+} (comme par exemple au Livermore National Laboratory [MARRS *et al.* 1995]), qui est l'ion le plus chargé pour lequel des mesures de précision des niveaux ont été effectuées. Conformément à l'usage, nous divisons donc les charges des ions accessibles expérimentalement en plusieurs groupes : les charges « faibles » ($1 \lesssim Z \lesssim 5$), « moyennes » (autour de $Z \simeq 45$) et « grandes » (du côté du noyau d'uranium, pour lequel $Z = 92$).

Parmi les avantages de cette méthode expérimentale, nous pouvons citer le faible encombrement du système (il est plus facile d'accélérer des électrons que des ions) et la relativement faible vitesse des ions en sortie (puisque ce sont les électrons qui viennent frapper les atomes et non le contraire), ce qui facilite les études spectroscopiques [SCHNEIDER *et al.* 1999].

.....

ECRIT Le principe le plus récent de production d'ions très chargés est celui de l'« *Electron Cyclotron Resonance Ion Trap* » (ECRIT), inspirée de dispositifs de production d'ions très chargés [CHAUVIN *et al.* 1998 ; XIE 1998] modifiés pour que les ions ne soient pas extraits mais piégés et étudiés. Dans un tel dispositif, des atomes et des ions piégés sont ionisés par choc contre des électrons tournant sous l'effet d'un champ micro-onde. Comme les électrons frappent de tous les côtés, les ions piégés ont de faibles vitesses, ce qui facilite les mesures d'énergies de transition grâce au faible décalage Doppler des fréquences X émises. Une source ECRIT est en cours de construction au Paul Scherrer Institut (PSI) en Suisse [SIMONS 1998].

I/3.1-b \diamond Anneaux de stockage

Après avoir produit des ions très chargés, il peut être nécessaire d'en accumuler suffisamment pour que l'intensité qu'ils produisent lors des transitions entre niveaux soit suffisante pour être détectée et utilisée. Ce besoin est la raison d'être d'anneaux de stockage (*storage rings*) comme l'*Experiment*

*Storage Ring*¹ [BEYER 1995b]. Un accélérateur injecte les ions dans cet anneau, qui les stocke afin d'obtenir un courant suffisamment important ; un système de refroidissement des ions grâce à des électrons (« *electron cooler* » [BEYER and STÖHLKER 1998 ; BEYER 1995b]) permet d'améliorer la qualité du faisceau en diminuant la dispersion en vitesse des ions. Le déplacement de Lamb du fondamental de l'uranium hydrogénéoïde a ainsi pu être mesuré à l'ESR [BEYER 1995a]. De plus, les électrons utilisés pour refroidir le faisceau d'ions ont permis d'étudier des processus de recombinaison diélectronique (capture d'un électron par un ion, avec excitation d'un second électron), avec des mesures spectroscopiques très précises [GLANS *et al.* 2001 ; LINDROTH *et al.* 2001].

1/3.2

Méthodes spectroscopiques

Une fois les ions ou les atomes obtenus et préparés, l'étape suivante consiste à mesurer des énergies de transition. De nombreuses techniques spectroscopiques ont contribué à atteindre des précisions de plus en plus grandes dans la mesure des fréquences de transitions atomiques. Nous présentons rapidement pour plusieurs systèmes simples quelques-unes des plus importantes.

1/3.2-a \diamond **Hydrogène atomique**

Expérience
historique

.....
La célèbre expérience de LAMB and RETHERFORD [1947] utilisait un champ radio-fréquence variable (autour du célèbre intervalle d'environ 1000 MHz) qui pouvait exciter la transition $2S_{1/2}-2P_{1/2}$ de l'hydrogène [HAKEN and WOLF 1993, Chap. 12] — entre des niveaux prédits comme *dégénérés* par l'équation de Dirac (voir les sections II/1.2-a et VI/2.1, ainsi que la figure I.1).

Nous avons représenté le principe de leur expérience dans la figure I.2. Celle-ci consiste à exciter des atomes d'hydrogène par bombardement d'électrons ; la population de l'état $2S_{1/2}$ reste relativement grande grâce à la très faible probabilité de transition de cet état vers le fondamental (puisque le fondamental $1S_{1/2}$ possède le même moment cinétique orbital). Si les atomes restent dans l'état $2S_{1/2}$, ils donnent une partie de leur énergie à des électrons de la plaque de tungstène sur laquelle ils arrivent, et ceux-ci créent un courant que l'on détecte. Par contre, si le champ radio-fréquence fait passer les atomes de l'état $2S_{1/2}$ à un état ($2P_{3/2}$ ou $2P_{1/2}$) pouvant tomber rapidement dans le fondamental, alors les atomes qui frappent la plaque de tungstène ne possèdent pas assez d'énergie pour provoquer de

¹L'ESR est un anneau d'une centaine de mètres de circonférence, construit au GSI (*Gesellschaft für Schwerionenforschung*), à Darmstadt.

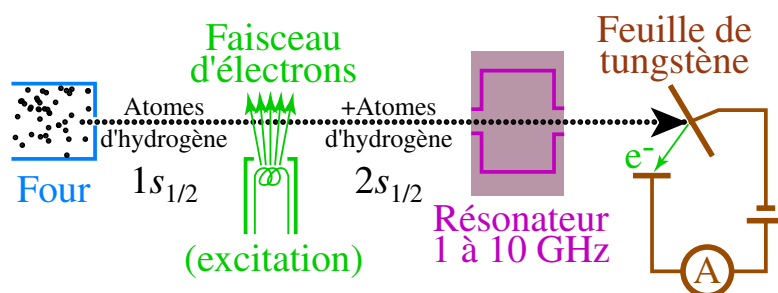


FIG. I.2 – *Principe de l'expérience historique de Lamb et Retherford.* Le cas dessiné est celui où le résonateur (générateur de micro-ondes) ne fait *pas* passer les atomes de l'état $2s_{1/2}$ à l'état $2p_{1/2}$: ils restent alors dans l'état excité $2s_{1/2}$ (métastable) et transfèrent leur énergie à des électrons de la plaque de tungstène, qui créent un courant détectable. Au contraire, si le résonateur fait passer les atomes dans l'état $2p_{1/2}$, ceux-ci se désexcitent rapidement vers l'état fondamental $1s_{1/2}$, et aucun courant n'est détecté dans l'ampèremètre (cas non dessiné).

courant, ce qui permet de détecter les transitions entre l'état métastable $2S_{1/2}$ et d'autres niveaux, en particulier le $2P_{1/2}$.

Mesures
optiques

Les meilleures mesures du déplacement de Lamb « classique » (*i. e.* celui du niveau $2S_{1/2}$) sont maintenant réalisées par laser [BIRABEN *et al.* 2001 ; NIERING *et al.* 2000 ; DE BEAUVOIR *et al.* 2000] : grâce à la précision des prédictions théoriques, il est possible de déduire avec une grande précision ce déplacement à partir de mesures de fréquences de transition comme par exemple $1S-2S$, $1S-3S$ et $2S-6S/D$ (transitions à *deux* photons, à cause de la règle de sélection sur les moments cinétiques orbitaux mentionnée plus haut). L'introduction, vers 1970, de lasers dont la fréquence est accordable a beaucoup contribué aux gains de précision obtenus, ainsi que la spectroscopie à deux photons (voir par exemple DE BEAUVOIR *et al.* [1997]), qui réduit de beaucoup le déplacement Doppler des fréquences.

Les mêmes expériences permettent aussi d'obtenir le déplacement de Lamb de l'état $1S$ de l'hydrogène atomique avec une très grande précision : la valeur meilleure valeur¹ expérimentale actuelle de ce déplacement est donnée à $3 \cdot 10^{-6}$ près [SCHWOB *et al.* 1999] : 8 172 837(22) kHz. Ce déplacement est sensible au rayon de charge du proton (grâce à l'orbitale S , qui possède une relativement grande probabilité de présence dans la région du noyau) : une comparaison entre théorie et expérience demande de connaître ce

¹La valeur du déplacement de Lamb du fondamental de l'hydrogène est environ huit fois plus grande que l'intervalle $2s_{1/2}-2p_{1/2}$, conformément à la loi générale en $1/n^3$ (où n est le nombre quantique principal) pour ce déplacement — *cf. infra*.

rayon [BIRABEN *et al.* 2001]. Deux valeurs contradictoires du rayon de charge du proton ont été publiées [HAND *et al.* 1963 ; SIMON *et al.* 1980 ; KARSHENBOIM 1999], si bien qu’obtenir d’autres fréquences de transition dans des systèmes dont le noyau est un proton permettrait d’accroître encore la qualité des tests de la théorie quantique des champs obtenus grâce aux mesures de précision dans les atomes. Ainsi, l’hydrogène muonique (où un muon remplace l’électron et orbite donc environ 200 fois plus près du proton que celui-ci) est le sujet d’études expérimentales [POHL *et al.* 2001] et théoriques [JUNGMANN *et al.* 2001] visant à mieux connaître la structure du proton.

La récente technique du *peigne de fréquence* utilise aussi des lasers. Elle promet de nouvelles mesures extrêmement précises d’énergies de transition : en comparant les fréquences émises à des millions de fines lignes laser (régulièrement espacées et réparties sur presque tout le spectre visible) dont la fréquence absolue peut être connue avec une grande précision. Le groupe de T. W. Hänsch en Allemagne a ainsi réalisé une mesure de la fréquence de la transition $1S-2S$ dans l’hydrogène atomique à $2 \cdot 10^{-14}$ près¹ [UDEM *et al.* 2001] — soit une amélioration de quatre ordre de grandeur en douze ans [RAMSEY 2001].

La précision de ces mesures optiques est fortement liée à la possibilité de comparer les lasers utilisés à un standard de fréquences, comme par exemple une horloge atomique [DE BEAUVOIR *et al.* 2000 ; BIRABEN *et al.* 2001 ; UDEM *et al.* 2001]. Les développements en cours dans ces deux domaines promettent de nouveaux tests extrêmement précis de la relativité et de la théorie des champs.

1/3.2-b \diamond Hélium

Niveaux
étudiés

L’hélium est le plus simple système atomique où l’interaction entre électrons — *i. e.* les « effets à plusieurs corps » (*many body*) — peut être étudiée. Les mesures dans ce système se divisent essentiellement en deux groupes.

D’une part les mesures de transitions vers un niveau² np/d (où n est le nombre quantique principal d’un niveau excité) permettent surtout de tester QED et d’obtenir des déplacements de Lamb³ [GIACOBINO and BIRABEN

¹C’est actuellement la meilleure précision obtenue sur une mesure optique [BIRABEN *et al.* 2001].

²Les niveaux excités de l’hélium que nous considérons ici sont produits par le passage de l’un des électrons du fondamental à un niveau excité. La notation utilisée pour représenter les niveaux de l’hélium est alors $n^{2s+1}L_J$, où n est le nombre quantique principal de ce niveau, où s est le spin total des deux électrons et L leur moment cinétique orbital total, dans l’état où ces deux moments cinétiques s’additionnent en un moment cinétique total J .

³Le déplacement de Lamb peut se définir [EIKEMA *et al.* 1996] dans l’hélium et les ions héliumoides comme la différence entre l’énergie d’ionisation expérimentale et une énergie calculée sans inclure QED — voir par exemple [DRAKE *et al.* 1993].

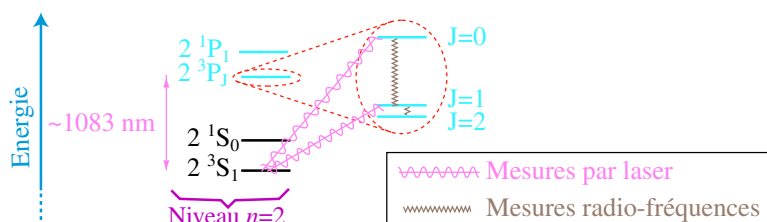


FIG. I.3 – *Structure du niveau $n = 2$ de l'hélium.* Plusieurs méthodes expérimentales ont été développées pour étudier cette structure « fine » de l'hélium (la structure fine est la structure de niveaux possédant le même nombre quantique principal). Deux principaux types de mesures existent : directe par micro-ondes, comme par exemple entre les différents niveaux du triplet P , ou bien par différence de deux fréquences optiques, comme par exemple pour des mesures à partir du triplet S_1 , comme nous l'avons représenté.

1982 ; EIKEMA *et al.* 1996].

D'autre part, les mesures de la structure fine de son niveau $n = 2$ — qui a l'avantage de posséder des intervalles plus grands que ceux de la structure fine de l'hydrogène, ainsi que des temps de vie plus longs [MINARDI *et al.* 1999] — permettent d'obtenir une valeur pour la constante de structure fine α [GEORGE *et al.* 2001]. Nous avons représenté cette structure fine dans la figure I.3.

De nombreuses expériences ont tenté d'améliorer les importants résultats expérimentaux obtenus sur cette structure fine il y a une vingtaine d'années [KPONOU *et al.* 1981, 1971], parfois avec des résultats surprenants [MINARDI *et al.* 1999 ; SHINER *et al.* 1994] (voir par exemple DRAKE [2001] pour une liste d'expériences sur l'hélium).

Techniques
expérimentales

Les fréquences de transition entre niveaux de la structure fine de l'hélium sont mesurées grâce à deux techniques principales : l'excitation *directe* entre niveaux (comme par exemple entre les niveaux $2^3P_{J=0,1,2}$ [GEORGE *et al.* 2001 ; STORRY *et al.* 2000], ce qui impose d'utiliser des *micro-ondes*), ou bien par différence entre les fréquences de transition depuis un même état (qui peut être excité par *laser* [MINARDI *et al.* 1999]) — des techniques interférométriques ont été développées pour déterminer précisément la fréquence de ces transitions [CASTILLEGA *et al.* 2000 ; SHINER *et al.* 1994]. Nous avons représenté ces deux possibilités dans la figure I.3.

Applications

Grâce à des prédictions théoriques d'une précision comparable à celle des expériences, celles-ci peuvent servir à mesurer la constante de structure fine α par une méthode supplémentaire, ce qui aide à déterminer sa valeur [MOHR and TAYLOR 2000 ; DRAKE 2001]. Ainsi, des résultats

expérimentaux remarquables sur la structure fine de l'hélium devraient prochainement donner, grâce à l'utilisation de résultats théoriques à venir, la deuxième détermination la plus précise de la constante de structure fine [GEORGE *et al.* 2001] — déjà mesurée à $23 \cdot 10^{-9}$ près [GEORGE *et al.* 2001]. Cette nouvelle détermination de la constante de structure fine est tout spécialement intéressante, car la mesure la plus précise de cette constante (déduite du moment magnétique de l'électron) en est située à quatre déviations standard [GEORGE *et al.* 2001]. Cette expérience, qui suit de peu les résultats surprenants obtenus sur le moment magnétique du muon [BROWN *et al.* 2001], pose des questions sur la validité de QED aux grandes échelles d'énergie et ouvre une porte à des théories comme la supersymétrie.

1/3.2-c \diamond Ions très chargés

.....
 Rayons X Les ions très chargés possèdent des électrons beaucoup plus liés que celui de l'hydrogène atomique : les mesures d'énergies de transition (ou de liaison) dans ces systèmes [BEYER 1995b ; BEYER *et al.* 1991 ; DESLATTES 1985] demandent de travailler avec des rayons X (d'énergies comprises entre quelques keV et environ 200 keV [BEYER 1995b] — et qui sont donc situés à des fréquences bien plus élevées que le spectre optique — voir par exemple HAKEN and WOLF [1993, Chap. 8]).

.....
 Difficultés Les expériences de spectroscopie X sur les ions très chargés sont compliquées par les faibles intensités généralement disponibles, la délicatesse des réglages des spectromètres (dont il faut de plus connaître avec grande précision les caractéristiques, comme par exemple la courbure d'un cristal de diffraction), ou bien encore les temps de vie des niveaux, qui décroît rapidement avec la charge du noyau [BEYER 1995b]. Cependant, des mesures du déplacement de Lamb du fondamental ont pu être effectuées pour de nombreux hydrogénoïdes lourds, depuis une vingtaine d'années (BRIAND *et al.* [1983] ; KÄLLNE *et al.* [1984] ; TAVERNIER *et al.* [1985] ; BEYER *et al.* [1985a] ; INDELICATO *et al.* [1986] ; BRIAND *et al.* [1989] ; BRIAND *et al.* [1990]¹ ; BEYER *et al.* [1991, 1993] ; STÖHLKER *et al.* [1993] ; BEYER *et al.* [1994])². D'autres mesures dans les ions très chargés fournissent de précieux tests de l'électrodynamique quantique en champ très intense : des mesures de niveaux d'énergie ont ainsi été effectuées dans des héliumoïdes moyennement et très chargés³ et dans les lithiuoïdes lourds [SCHWEPPE *et al.* 1991 ; BEIERSDORFER *et al.* 1998 ; STAUDE *et al.* 1998 ; BOSSELMANN *et al.* 1999].

¹Cet article présente la première mesure de la transition $2p-1s$ dans l'uranium hydrogénoïde.

²La mesure la plus précise (avec une incertitude relative de 2 %) du déplacement de Lamb du niveau $1s$ dans les ions lourds hydrogénoïdes est celle de BEYER *et al.* [1991] (effectuée dans le nickel hydrogénoïde) — voir MOHR *et al.* [1998, p. 349].

³Les premières expériences remontent à environ vingt ans : MARRUS *et al.* [1989] ; DUNFORD *et al.* [1991] ; INDELICATO *et al.* [1992] ; BIRKETT *et al.* [1993] ; MARRUS *et al.*

Systèmes simples exotiques

D'autres systèmes simples que ceux que nous venons de mentionner possèdent un intérêt particulier pour tester les théories fondamentales. Ainsi, des études expérimentales ont été effectuées sur l'hydrogène muonique (où un muon remplace l'électron, ce qui permet, grâce à sa masse 200 fois supérieure, de sonder plus la structure du proton) [POHL *et al.* 2001], ou encore le muonium [JUNGMANN *et al.* 2001] et le positronium [CONTI *et al.* 2001] (où la seule force en jeu est l'interaction électromagnétique, ce qui en fait des tests « purs » de QED). D'autres systèmes ont aussi reçu une certaine attention, comme par exemple des atomes « exotiques » où un électron est remplacé par un anti-proton (voir par exemple la partie IX de KARSHENBOIM *et al.* [2001] et GOTTA *et al.* [1999]), ou bien encore un pion [LENZ *et al.* 1998].

SECTION 4 (Chapitre I)

De QED aux niveaux atomiques

Relativité et QED

Un grand nombre de mesures expérimentales d'énergies de transition (ou de liaison) dans les atomes simples (à quelques électrons) ont atteint un tel niveau de précision que la théorie de l'électrodynamique quantique (QED) est *nécessaire* à leur interprétation. Ceci est vrai aussi bien dans les atomes dont le noyau est faiblement chargé (comme par exemple l'hydrogène [DE BEAUVOIR *et al.* 2000]) que dans les ions lourds (comme par exemple l'uranium hydrogénéoïde [STÖHLKER *et al.* 1993 ; BEYER 1995a]).

Relativité

Dès que le noyau possède un numéro atomique Z élevé, les électrons qui en sont proches (comme par électrons internes d'un atome ou l'électron d'un hydrogénéoïde dans son état fondamental) possèdent des vitesses relativement proches de la célérité c de la lumière¹.

On peut le voir quantitativement de la façon suivante [DESCLAUX 1983]. Prenons comme approximation de départ pour un électron proche du noyau celui d'un électron isolé autour d'une charge ponctuelle Ze (où $-e < 0$ est la charge de l'électron), traité par l'équation de Schrödinger (voir par exemple COHEN-TANNOUJDI *et al.* [1977]). Il est bien connu que l'énergie

[1995] ; STÖHLKER *et al.* [1996] ; MYERS *et al.* [1999] ; MYERS and TARBUTT [2000]. Ces expériences ont été effectuées suite à des prédictions théoriques d'une partie de la structure fine des ions héliumoides [INDELICATO *et al.* 1989].

¹Ainsi, même pour un noyau aussi peu chargé que celui de l'hydrogène, la vitesse moyenne de l'électron est de l'ordre de 3000 km/s.

du fondamental est de l'ordre de $(Z\alpha)^2 m_e c^2$ — où $\alpha \equiv e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ est la constante de structure fine et où m_e est la masse de l'électron. D'après le théorème du viriel, cette énergie est la somme d'une énergie cinétique et d'une énergie potentielle électrostatique du même ordre de grandeur, *i. e.* en $(Z\alpha)^2 m_e c^2$. En conséquence, la vitesse moyenne v de l'électron est de l'ordre de $v \simeq Z\alpha c$ (toujours dans l'approximation non relativiste de l'équation de Schrödinger). Ainsi par exemple, si l'on considère que les vitesses sont relativistes pour $v/c \simeq 0,1$, on obtient des électrons relativistes pour des noyaux tels que $Z \gtrsim 14$; si l'on prend comme critère $(v/c)^2 \simeq 0,1$, les électrons autour des noyaux de $Z \gtrsim 40$ sont relativistes [DESCLAUX 1983]. Les ions lourds accessibles expérimentalement (*cf.* section I/3.1) nécessitent donc clairement de prendre la relativité en compte dans la prédiction des niveaux atomiques.

Comme nous l'avons mentionné plus haut, inclure la relativité restreinte dans la mécanique quantique peut se réaliser, pour les particules de spin $1/2$, grâce à l'équation de Dirac [DIRAC 1926 ; ROSE 1961]. Nous rappelons la forme de cette équation dans la section II/1.2-a et donnons des détails sur ses solutions pour un champ central dans la section VI/2.1.

.....
 Théorie des
 champs

Depuis la mesure historique du déplacement de Lamb (entre les niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'hydrogène [LAMB and RETHERFORD 1947]) et sa prédiction [BETHE 1947], l'électrodynamique quantique est restée nécessaire à l'interprétation et à la prédiction des niveaux atomiques de l'*hydrogène*.

Dans les ions lourds (Z grand), les déplacements en énergie dûs à QED sont encore plus importants que dans l'hydrogène. On peut interpréter l'effet de QED comme venant des *fluctuations du vide* (selon une interprétation due à Welton, que l'on peut trouver par exemple dans SCHWEBER [1961, p. 358], KUHN [1969] ou EIDES *et al.* [2001, chap. V]), de la façon suivante.

Comme nous l'avons vu plus haut, le champ électromagnétique est considéré par QED comme une superposition d'excitations élémentaires semblables à des oscillateurs harmoniques quantiques; or, de tels oscillateurs possèdent comme fondamental un mode d'*énergie non nulle*, si bien qu'un électron n'est jamais dans un vide absolu mais est constamment soumis à un champ électromagnétique fluctuant. Sous l'effet de ce champ fluctuant, un électron subit le champ du noyau sur un certain voisinage de sa position moyenne et son énergie est ainsi déplacée par rapport à l'équation de Dirac. Lorsque Z est grand, les variations du champ électrique du noyau autour de la position moyenne de l'électron sont importantes — l'électron étant proche du centre —, et le déplacement prédit par QED aussi. Quantitativement, celui-ci est de l'ordre de $\alpha(Z\alpha)^4 m_e c^2/n^3$ [MOHR 1974b], où n est le nombre quantique principal du niveau considéré. L'amplitude (en énergie) du déplacement dû à QED croît donc très vite¹ avec la charge du noyau; il

¹Par exemple, le *déplacement* du fondamental dû à QED dans l'uranium hydrogénéoïde

croît aussi *relativement* à l'énergie de liaison, qui est en $(Z\alpha)^2 m_e c^2 / n^2$ (selon l'équation de Dirac [ROSE 1961 ; GREINER *et al.* 1985]), conformément à ce qui est indiqué dans la figure I.4, p. 33.

On peut aussi interpréter une partie de l'effet de QED comme venant de la création de paires électron-positron virtuelles qui polarisent le vide (à la façon des dipôles d'un diélectrique) et ajoutent leur champ à celui du noyau, ce qui résulte en un déplacement des niveaux par rapport aux prédictions de l'équation de Dirac [GREINER *et al.* 1985, Chap. 1].

Effets à
plusieurs
corps

Les effets de QED peuvent aussi être étudiés dans les *atomes*. En particulier, les atomes qui possèdent un électron de valence sur une couche $ns_{1/2}$ (n étant le nombre quantique principal du niveau) permettent de mesurer l'intervalle $ns_{1/2} - np_{1/2}$, appelé aussi « déplacement de Lamb », par analogie avec l'hydrogène. Prédire cet intervalle d'énergie dans les atomes demande bien sûr d'inclure dans les calculs les effets à plusieurs corps. Des résultats expérimentaux et théoriques [BLUNDELL 1993] ont été obtenus récemment dans ce domaine (grâce à l'étude de résonances dans les sections efficaces de collision entre ions et électrons [LINDROTH *et al.* 2001] — avec des applications dans l'étude des plasmas en astrophysique et dans le domaine de la fusion nucléaire).

L'étude des atomes et des ions à plus d'un électron est compliquée par la nécessité de prendre en compte les « effets à plusieurs corps » (ensemble des interactions entre les électrons). Il n'est actuellement pas possible d'incorporer en pratique *tous* les effets de QED (à un certain ordre) dans le calcul numérique des niveaux d'énergie d'un atome possédant un « grand » nombre d'électrons (environ plus de trois électrons) : le nombre d'interactions entre électrons devient trop important, et celles-ci sont compliquées — en particulier par les effets relativiste de temps de propagation de l'interaction électromagnétique (« *retardation effects* » [BREIT 1929, 1932 ; MANN and JOHNSON 1971]).

Cependant, des traitements approximatifs permettent d'incorporer QED dans d'autres méthodes de calcul des niveaux atomiques. Ces méthodes se divisent selon deux grands principes : celles fondées sur des calculs *variationnels*¹ et celles qui s'appuient sur une théorie des *perturbations* à plusieurs corps² [LINDGREN and MORRISON 1986 ; LINDGREN 1985], introduite

est de l'ordre de 500 eV [BEYER 1995a] — comme donné par l'ordre de grandeur $\alpha(Z\alpha)^4 m_e c^2$ mentionné plus haut —, à comparer à l'énergie d'ionisation de l'hydrogène (13,6 eV).

¹Les premiers calculs variationnels à plusieurs corps qui incluent la relativité ou encore les « effets de corrélations » (*correlation effects* — qui prennent en compte l'effet du mouvement instantané des électrons plutôt que d'utiliser leur répartition moyenne) remontent à GORCEIX *et al.* [1987], INDELICATO *et al.* [1987], et INDELICATO [1988]. Il est possible d'inclure certains effets de QED dans de tels calculs à N corps [INDELICATO and DESCLAUX 1990].

²L'un des premiers calculs de niveaux d'énergie par la théorie des perturbations à

en physique atomique par KELLY [1963]. Ces deux approches, combinées à QED, permettent des prédictions très précises des niveaux d'énergie atomiques [SAPIRSTEIN 1998], y compris lorsque le nombre d'électrons est important [INDELICATO and LINDROTH 1992 ; INDELICATO *et al.* 1998].

Calculs perturbatifs contre non perturbatifs

Dans le calcul du déplacement de Lamb par BETHE [1947], le champ de photons est couplé à des électrons essentiellement décrits par l'équation de Schrödinger (voir par exemple HAKEN and WOLF [1993, § 15.5.2] pour une forme simple de ce calcul). Les calculs modernes de déplacements dus à QED suivent essentiellement deux approches, *a priori* adaptées à des situations physiques différentes : l'une est restreinte aux systèmes de deux charges comparables (comme par exemple l'hydrogène ou l'hélium, mais aussi le muonium — un muon positif et un électron), où la force électromagnétique entre les charges est suffisamment faible pour pouvoir effectuer un développement perturbatif en sa constante de couplage ; l'autre approche est au contraire adaptée au traitement de systèmes où quelques électrons [INDELICATO 1999] sont liés à un noyau très chargé (ion lourd) auquel les électrons sont très fortement liés. La constante de couplage entre le noyau et un électron étant $Z\alpha$ (l'énergie coulombienne entre deux charges Ze et $-e$ séparées de la distance r s'écrit en effet $-\hbar c \frac{Z\alpha}{4\pi r}$, et nous prendrons $\hbar = c = 1$), ces deux calculs sont dits respectivement « perturbatif » et « non perturbatif en $Z\alpha$ » — ou même parfois « non perturbatif », pour le second type de calcul où cependant l'interaction *entre électrons* (ou d'un électron avec lui-même) est toujours traitée perturbativement.

Systèmes faiblement liés

Les systèmes où les charges sont peu liées (*i. e.* où la constante de couplage de l'interaction électromagnétique est de l'ordre de la constante de structure fine α , comme par exemple l'hydrogène ou l'hélium) sont traités par des méthodes particulières, que nous présentons ici. Les systèmes où l'interaction électromagnétique est plus forte, comme par exemple dans les ions lourds très chargés, seront traités dans la section I/4.4.

N corps et qui incluent interactions relativistes et effets de corrélation entre électrons se trouve dans BLUNDELL *et al.* [1988a, 1989]. Il est possible d'inclure partiellement les contributions de QED (notamment la self énergie) dans ce formalisme [BLUNDELL *et al.* 1988a, 1990a ; CHENG *et al.* 1991 ; JOHNSON *et al.* 1995].

I/4.3-a \diamond **Hydrogène et hydrogénoïdes peu chargés**

Une revue de l'état de l'art dans le domaine des calculs perturbatifs (en l'interaction électron-noyau) des niveaux des hydrogénoïdes légers peut être trouvée dans EIDES *et al.* [2001].

.....
 Électrons
 libres

Dans cette approche, l'électron est considéré comme *libre* en dehors des instants où il interagit (avec le champ électromagnétique du noyau ou des photons). Ainsi par exemple, on peut étudier la contribution du diagramme



qui donne dans ce formalisme la contribution principale de QED aux niveaux d'énergie de l'hydrogène [EIDES *et al.* 2001, Chap. V] : on y voit un électron (libre) émettre un photon, subir l'influence du noyau (représenté par la croix) et réabsorber le photon qu'il a émit (ce processus d'influence de l'électron sur lui-même par l'intermédiaire d'un photon est appelé « *self énergie* »). La propagation de l'électron est représentée par des lignes simples continues qui indiquent que l'électron est *libre* : on voit graphiquement l'approximation qui consiste à traiter perturbativement l'interaction qui le lie au noyau.

.....
 Calculs
 longs

Pour obtenir des évaluations numériques des niveaux d'énergie dans l'hydrogène qui atteignent le niveau des précisions expérimentales [DE BEAUVOIR *et al.* 2000] il est nécessaire d'inclure un grand nombre de diagrammes semblables à (I.1a) (comme par exemple les 19 diagrammes de EIDES *et al.* [2001, p. 50]). Et les calculs analytiques prennent parfois des proportions énormes (contenant jusqu'à des milliers ou des dizaines de milliers de termes [MELNIKOV and VAN RITBERGEN 2000 ; PACHUCKI and KARSHENBOIM 1998], traités par ordinateur), comme par exemple ceux liés au diagramme suivant, dont la contribution a été calculée très récemment [MELNIKOV and VAN RITBERGEN 2000] :



.....
 Comparaison
 avec les
 calculs non
 perturbatifs

Des techniques numériques puissantes ont récemment permis [JENTSCHURA *et al.* 1999a ; JENTSCHURA 1999] d'utiliser dans l'hydrogène et les hydrogénoïdes peu chargés les schémas de calcul de niveaux d'énergie développés pour les ions lourds par MOHR [1974a]. Les résultats obtenus par ces méthodes sont importants, car ils donnent des évaluations indépendantes des prédictions perturbatives que nous venons de décrire. Ainsi, certains déplacements en énergie obtenus dans l'hydrogène par des méthodes perturbatives sont d'une validité récemment remise en question

[MALLAMPALLI and SAPIRSTEIN 1998 ; YEROKHIN 2000, 2001] grâce à des comparaisons à des évaluations non perturbatives en l'interaction électron-noyau.

Les calculs perturbatifs de déplacement de niveau dans les ions hydrogénoïdes souffrent de leur nature même : ils donnent actuellement des valeurs numériques qui diffèrent en général significativement des résultats non perturbatifs pour $Z \gtrsim 15$ [MOHR *et al.* 1998, pp. 232–233] — les derniers résultats (non encore publiés) obtenus dans ce domaine améliorent cependant la situation (*cf.* appendice D). De plus, certaines contributions que l'on pensait négligeables sont parfois beaucoup plus grandes qu'attendu [PACHUCKI 2001].

I/4.3-b \diamond Hélium

L'hélium est un système beaucoup plus compliqué que l'hydrogène [PACHUCKI 1999], pour de nombreuses raisons, dont entre autres les suivantes : aucune solution analytique de son équation de Schrödinger (non relativiste) n'est connue, et il apporte les difficultés liées à un problème à plus de deux corps (où l'on ne peut appliquer des méthodes de particule réduite). Ainsi, des techniques particulières ont été développées afin d'obtenir ses niveaux d'énergie.

Une première difficulté consiste à obtenir de bonnes estimations des énergies du modèle non relativiste de l'hélium. Des progrès importants ont été réalisés grâce à l'introduction de bases de fonctions d'onde performantes [BAKER *et al.* 1990 ; DRAKE 1987] qui ont servi dans des méthodes variationnelles d'obtention des niveaux.

Une contribution importante aux niveaux d'énergie de l'hélium provient du logarithme de Bethe de ce système, qui n'a été évalué que récemment [KOROBV and KOROBV 1999] avec une précision qui dépasse celle de calculs datant d'il y a 30 ans [SCHWARTWZ 1961].

Inclure les corrections de QED dans le problème à trois corps que représente l'hélium se réalise généralement [PACHUCKI 1999 ; ZHANG *et al.* 1996] grâce à l'équation de Bethe et Salpeter. Les calculs perturbatifs des corrections en énergie dues à QED sont, comme pour l'hydrogène, difficiles et longs [PACHUCKI 1999 ; ZHANG *et al.* 1996 ; ZHANG and DRAKE 1996 ; ZHANG 1996 ; DRAKE *et al.* 1993].

Comme nous l'avons vu dans la section I/3.2-b, les estimations théoriques de la structure fine de l'hélium doivent atteindre des précisions semblables à celles des expériences afin de pouvoir en extraire des estimations pour la constante de structure fine α , pour laquelle les résultats expérimentaux actuels donnent des résultats contradictoires [MOHR and TAYLOR 2000 ; GEORGE *et al.* 2001]. Il est ainsi nécessaire d'obtenir des prédictions théoriques encore plus précises de la structure fine de l'hélium.

I/4.4

Approche non perturbative de l'interaction électron-noyau

I/4.4-a \diamond PrincipeÉlectrons
liés

L'approche non perturbative (en l'interaction électron-noyau) du calcul des niveaux d'énergie par QED mène à des calculs d'une nature très différente de ceux de l'approche perturbative : le point de départ de la théorie consiste à considérer que les électrons sont liés au noyau d'une façon décrite par l'équation de Dirac, qui inclut la relativité (restreinte) et l'interaction électrostatique (*cf.* section II/1.2-a) — ce qui aurait pour équivalent dans la théorie perturbative décrite ci-dessus de sommer à tous les ordres la contribution des diagrammes contenant 0,1,2,... interactions avec le noyau. La théorie qui inclut l'interaction électron-noyau non perturbativement dans QED est appelée l'« électrodynamique des états liés » [FURRY 1951 ; MOHR 1985]. Une revue récente sur les corrections de QED dans ce cadre non perturbatif peut être trouvée dans MOHR *et al.* [1998]. Dans la suite de cette thèse, nous n'utilisons uniquement cette approche *non perturbative* (« en $Z\alpha$ », *i. e.* en l'interaction électron-noyau — et qui est équivalente à une sommation des calculs perturbatifs à tous les ordres en $Z\alpha$).

Étapes pour
les
prédictions
théoriques

Elle pose (et a posé) plusieurs difficultés. La première, d'ordre fondamental, consistait à incorporer de façon simple à QED [DYSON 1949a,b] l'influence non perturbative de l'attraction des noyaux très chargé sur les électrons, ce qui a donné l'électrodynamique quantique des états liés [FURRY 1951].

Une deuxième étape demande d'obtenir de cette théorie des *expressions formelles* qui donnent la contribution de QED aux niveaux d'énergie (*cf.* section II/2). Une première réponse à ce problème est venue de GELL-MANN and LOW [1951] et SUCHER [1957], qui ont fourni les bases d'une méthode restreinte au calcul des niveaux d'états *isolés*¹. Jusqu'à récemment [SHABAEV 1988b, 1990a], aucune méthode générale d'obtention des prédictions formelles de QED pour les niveaux quasi-dégénérés n'existait². La méthode de SHABAEV [1990a], telle qu'elle est publiée, laisse cependant de nombreuses questions ouvertes sur les justifications mathématiques de sa validité, ainsi que sur son aptitude à permettre des cal-

¹Il est habituel d'entendre par « isolés » des niveaux non perturbés dont le déplacement en énergie sous l'effet de QED peut être étudié *perturbativement* de façon *indépendante de celle des autres niveaux*. Ceci arrive par exemple lorsque le hamiltonien d'interaction ne connecte pas le niveau étudié à d'autres niveaux d'énergie identique (niveaux dégénérés) ou proche (niveaux quasi-dégénérés). Pour la notion de quasi-dégénérescence des niveaux, on pourra par exemple consulter MESSIAH [1964].

²Nous pouvons aussi citer la récente méthode de LINDGREN [2000] et LINDGREN *et al.* [2001], qui est la seconde à pouvoir obtenir les énergies prédites par QED pour des niveaux quasi-dégénérés.

culs systématiquement faisables. Je consacre ainsi les chapitre II–chapitre V à une présentation détaillée de cette méthode « de la fonction de Green à deux temps » (chapitre III), que d’une part je complète pour la rendre suffisamment fondée (chapitre IV) et que d’autre part je rends utilisable de manière *systématique* (chapitres IV et V).

Une troisième et dernière étapes vers les prédictions par QED de niveaux atomiques consiste à obtenir la valeur numérique des expressions formelles obtenues pour les déplacements en énergie. Plusieurs méthodes — utilisant souvent des ordinateurs massivement parallèles, mais des schémas de calcul différents — ont été développées pour ce faire (voir par exemple MOHR [1974a] ; BLUNDELL [1993] ; PERSSON *et al.* [1996] ; INDELICATO and MOHR [2001] et les références du chapitre VI).

1/4.4-b \diamond Hydrogène et hydrogénoïdes

Dans ce formalisme, la contribution principale de QED aux niveaux des ions hydrogénoïdes — l’équivalent de (I.1a) — est la « self énergie »¹ [BROWN *et al.* 1959 ; BROWN and MAYERS 1959 ; DESIDERIO and JOHNSON 1971 ; MOHR 1974b,a] notée


(I.2a)

où les lignes dessinées en traits doubles représentent un électron se propageant *dans le champ du noyau* — par opposition aux électrons libres des diagrammes (I.1). La contribution de (I.2a) aux énergies de l’électron des hydrogénoïdes a été évaluée numériquement pour de nombreux niveaux électroniques et numéros atomiques Z (depuis les travaux fondateurs de BROWN *et al.* [1959], BROWN and MAYERS [1959] et de DESIDERIO and JOHNSON [1971]). Plusieurs méthodes sont disponibles pour ce faire (*cf.* chapitre VI), mais la plus précise d’entre elles [MOHR 1974a] est restée longtemps restreinte aux déplacements en énergie de niveaux de faible moment cinétique total (nombre quantique $j \leq 3/2$) ; grâce aux résultats analytiques que j’ai obtenus et qui sont présentés dans le chapitre VI et dans LE BIGOT *et al.* [2001a], cette limitation n’existe plus.

Dans les hydrogénoïdes, le diagramme qu’il est actuellement nécessaire de calculer [YEROKHIN 2000] ne possède pas beaucoup plus de photons que la self énergie (I.2a), puisqu’il s’agit de la self énergie à deux boucles


(I.2b)

dont la contribution aux niveaux d’énergie a été calculée seulement partiellement [MALLAMPALLI and SAPIRSTEIN 1998 ; YEROKHIN 2000] ; la présence de deux self énergies complique les calculs numériques, car l’énergie virtuelle

¹On peut voir la self énergie comme l’influence électromagnétique de l’électron sur lui-même, comme le suggère le photon émis et absorbé dans (I.2a).

de chacun des deux photons peut prendre toutes les valeurs possibles, sur lesquelles il faut intégrer numériquement.

Les contributions de tous les autres diagrammes à deux photons ont par contre été évaluées au cours des dix dernières années, pour divers états électroniques et divers numéros atomiques Z [MOHR *et al.* 1998, § 8].

I/4.4-c \diamond Hélium et héliumoïdes

Les expériences sur les ions héliumoïdes mentionnées dans la section I/3.2-c rendent nécessaire l'inclusion des processus à *deux* photons pour expliquer les niveaux d'énergie à l'aide de l'électrodynamique des états liés¹.

Dans les ions héliumoïdes, les corrections de QED aux niveaux d'énergie se séparent en deux groupes : celles où un seul électron subit des photons virtuels, comme par exemple la double self énergie (I.2b) (dont la contribution aux énergies n'a encore jamais été calculée complètement [YEROKHIN 2000]), et ceux où un processus d'échange de photons fait intervenir les deux électrons.

Il est ainsi nécessaire de prendre en compte l'influence des processus à deux photons sur l'interaction *entre électrons* ; ainsi, les contributions des diagrammes suivants aux niveaux d'énergie dans les héliumoïdes ont été calculées directement à partir des principes de QED (« *ab initio* QED calculations »), pour *certain*s niveaux atomiques :

- l'échange de deux photons virtuels [LINDGREN *et al.* 1993a ; BLUNDELL *et al.* 1993 ; LINDGREN *et al.* 1995 ; PERSSON *et al.* 1996 ; MOHR and SAPIRSTEIN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001]² :

(I.3a)

(qui représente une correction de QED à l'interaction coulombienne entre électrons),

- la self énergie écrantée (par un électron) [INDELICATO and MOHR 1991 ; BLUNDELL 1993 ; YEROKHIN and SHABAEV 1995, 1996b,a ; PERSSON *et al.* 1996, 1997 ; YEROKHIN *et al.* 1997 ; INDELICATO and MOHR 1998a, 2001]³ (où les calculs sont soit

¹Un traitement par QED de l'interaction entre charges (en incluant en particulier la propagation à vitesse finie de l'interaction électromagnétique) est préférable à des traitements limités en précision par les approximations qui y sont faites — parfois simplement sur des bases de plausibilité [BLUNDELL 1993]. Cependant, de tels traitements approchés ont été appliqués pour obtenir les niveaux d'énergie de l'hélium, comme par exemple grâce à des techniques de calculs à plusieurs corps (*Relativistic Many-Body Perturbation Theory* en particulier) [BLUNDELL *et al.* 1988a,b, 1990b,a ; CHEN *et al.* 1995].

²Le déplacement dû à l'échange de deux photons est calculé pour des états *quasi-dégénérés* uniquement dans la dernière référence [LINDGREN *et al.* 2001].

³Les références mentionnées ici se différencient par le type d'évaluation qu'ils effectuent pour la self énergie écrantée : calcul complet ou approximatif, niveau fondamental ou excité, atome à deux électrons ou plus, noyau ponctuel ou de taille finie, *etc.*

complets soit partiels, traitent le noyau comme ponctuel ou comme possédant une taille finie) :



(où l'influence de la self énergie sur un électron est modifiée par l'autre électron),

– la polarisation du vide avec écrantage [PERSSON *et al.* 1996 ; ARTEMYEV *et al.* 1999, 2000] :



(où la création de paires électron-positron influence l'interaction entre électrons).

Perspectives

L'influence de QED sur l'interaction entre électrons (I.3) demande des efforts de recherche supplémentaires. Les calculs de niveaux d'énergie dans les héliumoides sont numériquement délicats, et tout particulièrement pour les états excités, si bien que peu de résultats numériques ont été obtenus pour les états *excités* des héliumoides : les premiers calculs de tels niveaux sont récents [ARTEMYEV *et al.* 2000 ; MOHR and SAPIRSTEIN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001], bien que la plupart des résultats expérimentaux concernent la structure fine des états du niveau $n = 2$ de l'hélium et des héliumoides [MOHR and SAPIRSTEIN 2000].

De plus, une complication supplémentaire apparaît dans l'hélium : la présence de niveaux *quasi-dégénérés* [MESSIAH 1964]. Plusieurs méthodes de calcul des niveaux de l'hélium [DRAKE 1996b ; PLANTE *et al.* 1994 ; CHENG and CHEN 2000] montrent que les niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 sont quasi-dégénérés¹ pour des noyaux de charge faible ou moyenne [ARTEMYEV *et al.* 2000 ; LE BIGOT *et al.* 2001b]. C'est pour cette raison que les premières

¹Précisément : il est nécessaire de calculer *simultanément* l'énergie de ces niveaux dans toute théorie des perturbations qui prend pour approximation d'ordre zéro des états 2^1P_1 et 2^3P_1 une superposition d'électrons qui ne subissent que le champ du noyau. En effet, les énergies des états propres de l'équation de Dirac (voir par exemple ROSE [1961]) indiquent que les niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 (qui sont des combinaisons linéaires des niveaux $1s_{1/2}2p_{1/2}$ et $1s_{1/2}2p_{3/2}$) sont séparés d'une énergie $(Z\alpha)^4 m_e c^2$ (en ordre de grandeur et en considérant que les électrons sont uniquement dans le champ du noyau) ; or la correction principale à l'énergie de ces électrons est la répulsion coulombienne, d'ordre $[(Z\alpha)^2/Z] m_e c^2$ (Z fois plus petite que l'énergie de liaison d'un électron dans le champ d'un noyau puisque le noyau les attire Z fois plus qu'ils ne se repoussent). On voit donc que le rapport entre le déplacement en énergie dû à la répulsion coulombienne entre les électrons et l'intervalle entre les niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 non perturbés varie comme $\alpha(Z\alpha)^{-3}$. Ainsi, pour des Z faibles ou moyens (par rapport à $1/\alpha$), la « perturbation » de répulsion coulombienne est importante et les niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 sont quasi-dégénérés.

contributions de QED aux énergies des niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 n'ont été obtenues que très récemment : les premiers résultats numériques remontent à ARTEMYEV *et al.* [2000], et d'autres contributions restent à évaluer numériquement pour ces états quasi-dégénérés, qui n'ont pu être traité théoriquement que relativement récemment [SHABAEV 1990a ; LINDGREN 2000 ; ARTEMYEV *et al.* 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001 ; LE BIGOT *et al.* 2001b].

Bien que les calculs de niveaux d'énergie par QED qui traitent l'interaction électron-noyau de façon non perturbative soient optimisés pour traiter des noyaux moyennement ou très chargés, il est possible de les utiliser aussi pour des prédictions des niveaux de l'hélium ; ceci est d'un intérêt tout particulier après les derniers résultats expérimentaux obtenus sur sa structure fine [GEORGE *et al.* 2001]. En effet, il est par exemple possible de vérifier que les développements perturbatifs (autour de $Z = 0$, *cf.* section I/4.3) sont cohérents avec les niveaux d'énergie non perturbatifs, de réaliser des estimations des coefficients perturbatifs en utilisant une série de niveaux calculés non perturbativement pour des noyaux de charge moyenne, voire en principe [INDELICATO and MOHR 2001] de réaliser directement des calculs de niveaux dans des ions de charge faible (ou bien des atomes), grâce aux techniques récemment développées pour l'hydrogène [JENTSCHURA *et al.* 1999a]. Comme mentionné dans la section I/3.2-b, obtenir des valeurs précises pour les niveaux de la structure fine de l'hélium permettrait de mesurer très précisément la constante de structure fine α , pour laquelle un certain nombre de résultats contradictoires existent.

I/4.4-d \diamond Lithiumoïdes

Il est aussi possible d'utiliser QED pour prédire les niveaux d'énergie dans les ions à trois électrons (lithiumoïdes)¹, voire dans les ions possédant un électron à l'extérieur de leur cœur électronique (comme par exemple ceux de la séquence du sodium ou du cuivre [BLUNDELL 1993]).

Au-delà de ces systèmes, le nombre d'électrons externes devient trop grand pour qu'un traitement direct par QED des niveaux d'énergie soit actuellement réalisable [INDELICATO 1999]. Cependant, il est possible (et parfois nécessaire) d'évaluer la contribution de QED aux niveaux atomiques de systèmes plus complexes (voir les références citées dans LE BIGOT *et al.* [2001a]). De plus, la méthode récemment développée dans LINDGREN [2000] et LINDGREN *et al.* [2001] (pour obtenir de QED des expressions formelles pour les niveaux d'énergie) possède un formalisme proche de celui de la

¹Les niveaux d'énergie des lithiumoïdes peuvent inclure les corrections de QED soit de façon approchée [BLUNDELL *et al.* 1988a ; INDELICATO and DESCLAUX 1990 ; INDELICATO and MOHR 1991 ; CHENG *et al.* 1991 ; MOHR 1993 ; BLUNDELL 1992, 1993 ; LINDGREN *et al.* 1993b ; PERSSON *et al.* 1993], soit de façon exacte [ARTEMYEV *et al.* 1999 ; YEROKHIN *et al.* 1999b, 1998 ; ARTEMYEV *et al.* 1995b].

théorie relativiste des perturbations à N corps (« *Relativistic Many-Body Perturbation Theory* »), ce qui permettra peut être d'inclure les techniques développées pour étudier les atomes dans un traitement (potentiellement) complet des effets de QED sur les niveaux atomiques.

I/4.4-e \diamond Difficultés des calculs non perturbatifs

Les calculs numériques de déplacements comme ceux dûs à la self énergie à une (I.2a) ou deux (I.2b) boucles doivent surmonter deux difficultés principales. La première difficulté provient du fait que les photons de (I.2a) et de (I.2b) ne possèdent pas une énergie (virtuelle) fixée [BARANGER *et al.* 1953], si bien qu'il est nécessaire d'intégrer *numériquement* sur leur énergie. La deuxième difficulté importante provient de l'usage d'électrons dans les champs du noyau, qui sont décrit par un propagateur (de Dirac-Coulomb [WICHMANN and KROLL 1956 ; BROWN *et al.* 1959]) relativement long à calculer numériquement (il contient des produits de fonctions de Whittaker [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972]). C'est pour ces raisons qu'il est en général nécessaire d'effectuer les calculs numériques de précision des corrections non perturbatives (en $Z\alpha$) sur des ordinateurs massivement parallèles (comme nous l'avons fait pour les résultats sur la self énergie (I.2a) présentés dans le chapitre VI).

Notons enfin que presque toutes les méthodes numériques développées pour calculer les déplacements dûs à QED souffrent d'importantes *compensations numériques*¹ lorsqu'elles sont appliquées à des électrons liés à des noyaux *faiblement chargés* ($1 \lesssim Z \lesssim 5$) [YEROKHIN 2000], si bien que peu de résultats non perturbatifs (en l'interaction électron-noyau) ont été publiés pour des noyaux faiblement chargés ; des stratégies ont cependant récemment été mises au point pour surmonter ces difficultés et ont donné des résultats remettant parfois en cause la validité des traitements perturbatifs — les avancées (récentes) dans ce domaine peuvent être trouvées dans les références de YEROKHIN [2000].

I/4.4-f \diamond Autres contributions aux niveaux atomiques

D'autres effets physiques que les échanges de photons entre électrons peuvent (et doivent) être inclus dans des prédictions précises des niveaux atomiques. Nous avons indiqué leurs amplitudes respectives dans la figure I.4, pour le niveau fondamental des ions hydrogénoïdes. Les deux contributions les plus importantes qui sont d'un type différent de celles que nous avons mentionnées jusqu'ici sont les corrections de recul du noyau et de

¹Les compensations numériques peuvent par exemple être dues à l'usage d'une jauge particulière pour le champ électromagnétique [YEROKHIN 2000] ou bien à la façon dont sont scindés en plusieurs termes les déplacements en énergie (*cf.* section VI/2.3).

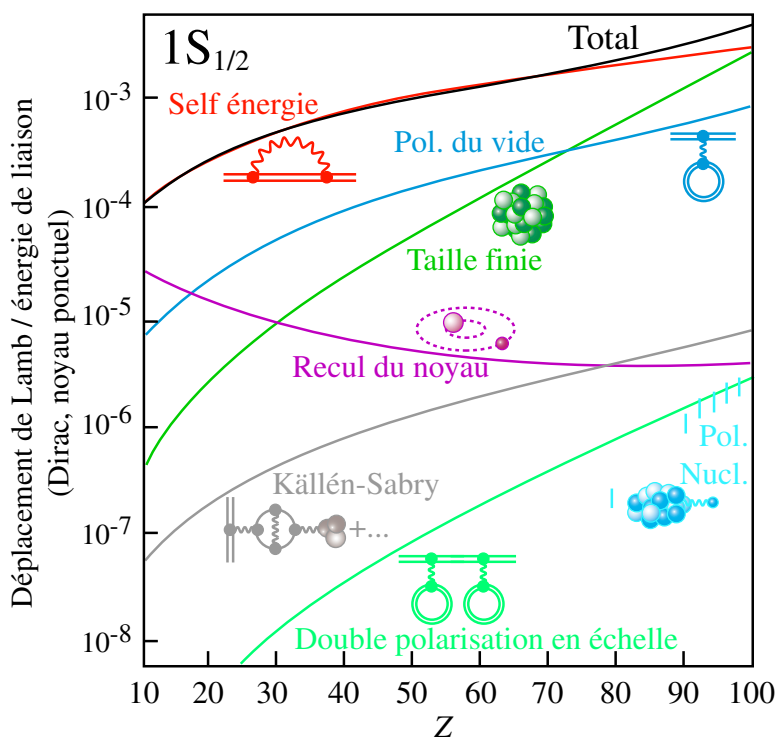


FIG. I.4 – Amplitudes de différentes contributions à l'énergie du fondamental des ions hydrogénoïdes. Ce graphe indique l'ensemble des corrections de QED (par rapport aux niveaux de Dirac) complètement évaluées pour le fondamental des hydrogénoïdes [BEIER *et al.* 1998]. On remarque en particulier que la self énergie domine et que la taille du noyau possède un effet important dans les ions très chargés. (« Pol. du vide » désigne la polarisation du vide — effet à un photon des créations de paires électron-positron —, la contribution de Källén-Sabry contient aussi d'autres diagrammes à deux photons et une interaction avec le noyau [BEIER *et al.* 1998], et « Pol. Nucl. » est la polarisation nucléaire — excitation du noyau par l'électron.)

taille finie du noyau, pour lesquelles des techniques particulières ont été développées.

.....

Recul du noyau Les calculs traitant de façon non perturbative l'interaction électron-noyau se fondent sur l'équation de Dirac pour un noyau *fixe*. Les effets de recul du noyau peuvent être inclus perturbativement dans les calculs de niveaux d'énergie (voir MOHR *et al.* [1998, § 7], SHABAEV [1998], SHABAEV [2001] et les références qui y sont citées). Les effets non relativistes du recul du noyau peuvent être incorporés au premier ordre en remplaçant à certains endroits la masse de l'électron par sa *masse réduite* ; les contributions relativistes [MOHR 1996] au recul du noyau doivent en général être prises en compte, car elles peuvent être plus importantes que les contributions non relativistes, comme par exemple dans l'uranium hydrogénéoïde [ARTEMYEV *et al.* 1995a].

Cependant, les corrections en énergie dues à la masse finie du noyau sont faibles par rapport aux effets de QED à un et deux photons (seuls effets calculés actuellement) (voir [JOHNSON and SOFF 1985] et la figure I.4). Elles atteignent cependant l'ordre de grandeur des incertitudes expérimentales actuelles et doivent être prises en compte [SHABAEV 2001].

.....

Taille finie du noyau Les effets de taille finie des noyaux lourds contribuent au niveaux d'énergie des ions hydrogénéoïdes de façon comparable aux corrections dues à QED : comme nous l'avons indiqué dans la figure I.4, il est absolument nécessaire de prendre en compte cette taille dans les systèmes proches de l'uranium hydrogénéoïde¹ si l'on veut mesurer le déplacement de Lamb de leur niveau fondamental.

Prendre en compte l'effet d'un noyau de taille finie dans les calculs numériques non perturbatifs (en l'interaction électron-noyau) demande de perdre l'avantage donné par l'utilisation des solutions analytiques de l'équation de Dirac pour un noyau ponctuel. Diverses stratégies ont été développées pour obtenir des solutions de l'équation de Dirac avec un noyau non ponctuel, soit *numériques* (DESCLAUX [1975, 1993] ; MOHR *et al.* [1998, §3] ; PERSSON *et al.* [1996, 1997] ; YEROKHIN *et al.* [1997] ; BEIER *et al.* [1998]), soit *analytiques* [GYULASSY 1975 ; SOFF and MOHR 1988 ; MOHR and SOFF 1993]. Ces techniques permettent d'évaluer dans le cadre relativiste de l'équation de Dirac les corrections de taille finie aux niveaux d'énergie.

.....

Structure hyperfine Enfin, un autre phénomène physique, l'influence du moment magnétique du noyau (non représentée dans la figure I.4), responsable de la structure hyperfine des niveaux, peut aussi être incluse dans l'électrodynamique des états liés [BODWIN *et al.* 1985 ; EIDES and SHELYUTO 1995 ; BEIER 2000] et

¹Rappelons que la taille finie du noyau est aussi important pour une comparaison entre théorie et expérience sur l'hydrogène (*cf.* section I/3.2-a).

servir à comparer les prédictions de QED en champ fort avec les mesures de structure hyperfine qui ont récemment débuté [BEIERSDORFER *et al.* 1998].

SECTION 5 (Chapitre I)

Conclusion

Les systèmes atomiques simples (hydrogène, hélium, ions hydrogénoïdes, héliumoïdes et lithiuoïdes, en particulier) sont d'excellents « laboratoires » pour l'étude des interactions fondamentales, et en particulier de la force dominante, la force électromagnétique (*cf.* section I/1).

I/5.1

Expériences

Les expériences sur ces systèmes stimulent nombre de domaines techniques (lasers, rayons X). Elles fournissent, combinées à des prédictions théoriques précises, des *mesures de certaines constantes fondamentales* (en particulier la constante de structure fine α et le Rydberg [BIRABEN *et al.* 2001]); ces mesures permettent des comparaisons entre différentes théories¹ — ou entre les prédictions d'une même théorie pour des situations physiques très différentes². Les précisions atteintes sur les mesures et sur les prédictions de niveaux atomiques de l'hydrogène sont tellement grandes que celles-ci sont sensibles à la taille du proton — la physique atomique rejoint la physique nucléaire.

I/5.2

Théorie

Des progrès théoriques sont nécessaires afin de pouvoir utiliser les résultats de nombre d'expériences de mesure de fréquences de transition.

I/5.2-a \diamond Hélium et héliumoïdes

La structure fine de l'hélium a été mesurée avec une précision qui dépasse souvent les prédictions théoriques (*cf.* section I/4.4-c). Des évaluations théoriques plus poussées de sa structure fine sont nécessaires : les contributions non relativistes et relativistes à ses niveaux sont très bien connues

¹La constante de structure fine est par exemple aussi mesurée grâce à l'effet Josephson (voir par exemple MOHR and TAYLOR [2000] et les références qui y sont contenues).

²La mesure la plus précise de la constante de structure fine α provient par exemple d'expériences sur le moment magnétique de l'électron (mesure du « $g - 2$ » [HUGHES and KINOSHITA 1999], où g est le facteur de Landé de l'électron). On pourra par exemple consulter KINOSHITA [2001] et MOHR and TAYLOR [2000].

[DRAKE 2001], et il est maintenant nécessaire d'inclure les corrections dues à QED. Ceci peut être réalisé perturbativement et de façon très précise [KOROBov and YELKHOVSKY 2001] grâce à la limite non relativiste de QED (*Non Relativistic Quantum Electrodynamics* — NRQED). Cependant, un tel traitement est inadapté aux ions très chargés, et une approche complètement relativiste de la structure fine de l'hélium permettrait une comparaison avec les développements perturbatifs (qui tirent parti de la faible charge du noyau d'hélium).

.....
 États quasi-dégénérés

L'hélium et les héliumoïdes de charge faible ou moyenne sont rendus difficiles à traiter théoriquement à cause d'une part du nombre de corps impliqués (trois), mais aussi à cause de la quasi-dégénérescence de leurs niveaux 2^1P_1 et 2^3P_1 . Une seule évaluation numérique de la correction de QED de ces niveaux est publiée [ARTEMYEV *et al.* 2000]. De plus, seules deux méthodes récentes peuvent donner des expressions formelles pour les énergies de ces niveaux quasi-dégénérées : la méthode formulée par Ingvar Lindgren [LINDGREN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001] et la méthode introduite par Vladimir Shabaev [SHABAEV 1988b, 1990a].

.....
 Méthode de la fonction de Green à deux temps

Cette dernière méthode n'a cependant pas été adoptée par la communauté internationale, malgré sa relative simplicité et sa généralité : nous présentons dans le chapitre III, sous une forme très détaillée et explicite, les principes de cette méthode tels qu'ils sont publiés. Je montre dans ce même chapitre que les principes de la méthode sont d'une part *incomplets* et souffrent de certaines difficultés mathématiques ; je les résous dans le chapitre IV et dans l'appendice B.

De plus, les calculs théoriques de niveaux d'énergie publiés avec cette méthode utilisent toujours une méthode *ad hoc* pour obtenir des expressions formelles de ces niveaux (sous la forme d'un hamiltonien effectif). Je propose dans la section IV/3 une méthode (« de la particule fantôme ») qui permet d'obtenir ces expressions formelles de façon *systématique* et *graphique* — les calculs de déplacements en énergie de niveaux isolés sont assez courts, mais obtenir ces déplacements pour des niveaux quasi-dégénérés est plus fastidieux, ce qui rend particulièrement intéressante la possibilité d'effectuer tous les calculs de façon graphique [LE BIGOT *et al.* 2001c,b].

I/5.2-b ◇ Hydrogène et hydrogénoïdes

En ce qui concerne l'hydrogène, les résultats *perturbatifs* (en l'interaction électron-noyau) obtenus pour ses niveaux ont donné récemment des contributions plus grandes qu'attendu (*cf.* section I/4.3-a), si bien qu'il est utile d'obtenir des évaluations non perturbatives (en l'interaction électron-noyau) de ces niveaux — qui permettent de plus de tester les prédictions perturbatives (*cf.* section I/4.3-a).

Obtenir des résultats non perturbatifs précis pour les déplacements en énergie dûs à QED dans l'hydrogène et les hydrogénoïdes demande de maîtriser des techniques performantes d'évaluation numérique. Les méthodes les plus précises de calcul de la contribution de self énergie (I.2a) [INDELICATO and MOHR 2001 ; JENTSCHURA *et al.* 1999a] sont fondées sur une méthode [MOHR 1974a,b] applicable seulement à des niveaux de faible moment cinétique ($j \leq 3/2$). J'effectue dans le chapitre VI des évaluations analytiques qui rendent cette méthode performante en principe applicable au calcul numérique de la self énergie de *n'importe quel niveau*. Ces résultats, incorporés au code développé en majeure partie par Peter Mohr et Paul Indelicato, m'ont permis d'obtenir la contribution de la self énergie pour de nombreux états atomiques des hydrogénoïdes [LE BIGOT *et al.* 2001a]. Leur précision permet d'envisager des études supplémentaires de l'effet de la self énergie dans l'hydrogène, que ce soit au travers de la confirmation qu'ils peuvent donner de résultats perturbatifs, ou par leur extension au calcul de la self énergie dans les ions peu chargés grâce à des méthodes développées récemment (*cf.* section VI/3.1). D'autre part, cette mise à l'épreuve des techniques numériques développées dans INDELICATO and MOHR [2001] permet d'envisager de les appliquer à la dernière contribution à deux photons non calculée dans les hydrogénoïdes, la self énergie à deux boucles (I.2b) — avec comme application des prédictions précises et non perturbatives des niveaux de l'hydrogène, qui permettraient de mesurer la taille du proton, pour laquelle deux valeurs incompatibles sont actuellement proposées (voir par exemple MOHR and TAYLOR [2000], POHL *et al.* [2001] ou BIRABEN *et al.* [2001]).

I/5.3

Bases théoriques et conventions

L'ensemble du travail présenté ici étant fondé sur l'électrodynamique quantique (QED), nous en rappelons les bases (et leur extension aux systèmes atomiques, l'« électrodynamique quantique des états liés ») dans le chapitre II.

Nous utiliserons souvent les unités relativistes, où $\hbar = c = 1$. Les indices répétés suivent la convention d'Einstein : ils doivent être sommés (sur $0, \dots, 3$ pour les indices grecs et sur $1, \dots, 3$ pour les indices latins). Enfin, nous indiquerons toujours par un accent circonflexe qu'un opérateur agit sur l'espace de Fock des particules de Dirac et des photons (comme par exemple dans $\hat{\psi}$).

Nous donnons d'autre part un *index* (p. 365), qui inclut en particulier la plupart des notations utilisées (les lettres grecques sont classées selon leur transcription en français) et qui est destiné à compléter la table des matières.

1/5. Conclusion

CHAPITRE II

De QED aux atomes

Sommaire

II/1	L'électrodynamique quantique des états liés	40
II/1.1	Présentation	40
II/1.2	QED	41
II/1.2-a	Équation de Dirac (I)	42
II/1.2-b	Espace des états	44
II/1.2-c	Le champ quantique électronique	46
II/1.2-d	Le champ quantique de photons	49
II/1.2-e	Le hamiltonien de l'électrodynamique. . .	49
II/1.3	Les atomes selon QED	52
II/1.3-a	Introduction	52
II/1.3-b	Hamiltonien en représentation de Schrödinger	53
II/1.3-c	Atomes et électrons selon QED	55
II/2	Niveaux atomiques par QED	57
II/2.1	La méthode de Gell-Mann–Low–Sucher	58
II/2.2	La méthode de l'opérateur d'évolution covariant	59
II/2.3	La méthode de la fonction de Green à deux temps	60

L'électrodynamique quantique des états liés

Présentation

Nous présentons dans ce chapitre la théorie que nous utilisons pour définir et calculer les niveaux d'énergie atomiques. Cette théorie, l'« électrodynamique quantique des états liés » (FURRY [1951]; JAUCH and ROHRLICH [1980, § 14.2]; MOHR *et al.* [1998]), est fondée sur la théorie quantique des champs (voir par exemple PESKIN and SCHROEDER [1995]). Cette théorie est la plus complète que l'on puisse utiliser actuellement pour décrire les atomes : elle inclut toutes les forces fondamentales (sauf la gravitation) et la relativité restreinte, processus de création de particules inclus. Elle n'a par ailleurs jamais été mise en défaut malgré des tests très sévères de ses prédictions (comme par exemple le moment magnétique de l'électron et du muon) ; seule une très récente expérience [BROWN *et al.* 2001] fait s'interroger sur les limites de sa validité. Nous rappelons dans ce chapitre les points de cette théorie qui nous seront nécessaires à la suite, c'est-à-dire surtout à l'exposition de la méthode de calcul des niveaux d'énergie atomiques que nous présentons dans les chapitres III–V.

Principe

En un mot, l'électrodynamique des états liés [FURRY 1951] est fondée sur QED (Quantum Electrodynamics) — utilisée dans les hautes énergies [PESKIN and SCHROEDER 1995 ; ITZYKSON and ZUBER 1980] —, mais où l'on modélise la présence du noyau atomique par un potentiel classique dans lequel se meuvent tous les électrons, et dont on ajoute simplement la contribution au hamiltonien de la théorie¹. Ainsi, ce potentiel n'est *pas* créé par des particules *de la théorie*, mais imposé « de l'extérieur » ; inclure théoriquement les effets de recul du noyau peut alors être réalisé perturbativement [SHABAEV 1998 ; ARTEMYEV *et al.* 1995b ; SHABAEV 1988a ; BODWIN *et al.* 1985]. Dans le présent mémoire, nous modéliserons le noyau atomique par un potentiel électrostatique, mais il est aussi possible d'inclure (dans un quadri-potentiel) le potentiel vecteur créé par le moment magnétique d'un noyau, afin de trouver les prédictions de QED pour la structure hyperfine du spectre atomique [SAPIRSTEIN and YENNIE 1990, p. 597]. La QED des hautes énergies est un cas particulier de l'électrodynamique des états liés, dont elle est la limite pour un potentiel extérieur nul.

¹L'invariance de l'espace par translation n'est bien sûr plus vérifiée dans un tel système où le potentiel atomique crée un centre privilégié. De plus, dans le cas d'un potentiel créé par un noyau, les référentiels où celui-ci est au repos deviennent privilégiés, ce qui fait perdre l'invariance de l'espace sous un certain nombre de transformations de Lorentz.

Plan Nous donnons ci-dessous des précisions sur ce formalisme, que nous serons amené à largement employer par la suite. Nous proposerons ensuite quelques remarques sur la façon dont l'objet complexe qu'est un *atome* est représenté au sein de l'électrodynamique des états liés.

II/1.2

QED

La description de QED que nous présentons ici est une version adaptée au potentiel extérieur imposé par le noyau atomique. Là où les livres de référence sur QED manipulent des électrons et positrons libres (allant à vitesse constante) [PESKIN and SCHROEDER 1995], l'électrodynamique des états liés les remplace par des électrons et positrons dans le potentiel d'un noyau atomique [FURRY 1951 ; MOHR *et al.* 1998]. Afin de présenter la théorie que nous utilisons, on comprend bien la nécessité d'introduire les outils théoriques suivants, où chacun repose sur le précédent :

1. l'*équation de Dirac*, qui décrit des particules ponctuelles de spin 1/2 (comme les électrons et les positrons) en incluant relativité (restreinte) et moment cinétique intrinsèque (spin) — mais sans inclure les effets dûs à la création et la destruction de particules ;
2. l'*espace des états physiques*, qui décrit un système physique contenant un *nombre quelconque de particules* (électrons, positrons et photons) ;
3. les *champs quantiques*, qui généralisent la fonction d'onde à valeurs complexes de l'équation de Schrödinger : ces champs ont la propriété (souhaitable) d'être solution des mêmes équations (de Dirac et Maxwell) que des champs « classiques » à valeurs complexes, mais font correspondre à chaque position de l'espace un *opérateur* ;
4. un *hamiltonien*, qui donne l'énergie totale d'un système physique composé d'électrons, de positrons et de photons.

Nous détaillons successivement ces objets qu'il est possible de définir de diverses manières à partir d'une théorie non quantifiée de l'interaction électromagnétique [WEINBERG 1995 ; KAKU 1993 ; HATFIELD 1992], en transformant les champs classiques (à valeurs complexes) en opérateurs et en injectant ces opérateurs dans le hamiltonien de la théorie, qui devient alors lui-même un opérateur quantique. Nous présentons le *résultat* de telles procédures, dans un ordre différent de celui qui mène à la construction de QED mais dans une forme adaptée à l'usage que nous en faisons dans ce mémoire.

II/1.2-a \diamond Équation de Dirac (I)

Le « modèle standard » des interactions fondamentales considère que *si* les électrons ne subissaient *pas* d'interaction avec d'autres particules de la théorie, les états stationnaires d'un système d'électrons seraient exactement donnés par une superposition d'états propres de l'équation de Dirac, qui est la seule équation d'onde dont on dispose pour *une* particule *relativiste* de spin 1/2. La théorie de l'électrodynamique quantique (QED) introduit entre les particules de Dirac une interaction dont le médiateur est le photon (*cf.* section II/1.2-e).

.....
 Électrons et positrons dans le potentiel du noyau

Puisqu'un *potentiel* extérieur (du noyau) est imposé aux électrons et aux positrons du modèle qui nous intéresse ici, il est pratique de prendre pour base des états d'un système à *une* particule les fonctions d'onde propres (donc stationnaires) de l'équation de Dirac pour ce potentiel électrostatique : nous prenons pour base des états à *une* particule les états atomiques propres ϕ_n de l'équation de Dirac

$$\{-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + q_e[V(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})] + m_e\beta\} \phi_n(\mathbf{x}) = \varepsilon_n \phi_n(\mathbf{x}), \quad (\text{II.1})$$

où nous avons noté (V, \mathbf{A}) le 4-potentiel électromagnétique extérieur choisi. Dans le hamiltonien de Dirac donné ci-dessus, nous avons noté — suivant l'usage — les matrices¹ 4×4 de Dirac par les symboles β et $\alpha^{i=1, \dots, 3}$ (qui sont les trois composantes du vecteur de matrices $\boldsymbol{\alpha}$) [PESKIN and SCHROEDER 1995]. Sachant que nous avons noté

$$q_e \equiv -e \quad (\text{II.2})$$

la charge de l'électron (avec $q_e < 0$) et m_e sa masse, on peut intuitivement reconnaître successivement dans ce hamiltonien l'énergie *cinétique*² (venant de la quantité de mouvement de la particule, donc donnée comme dans l'équation de Schrödinger par un gradient), l'énergie *électrostatique* d'un *électron* (pas celle d'un positron!) et son énergie *de masse*, qui s'additionnent pour donner l'énergie totale ε_n d'un *électron* ; nous ne considérerons dans ce mémoire que le cas d'un potentiel vecteur \mathbf{A} *nul*, ce qui revient essentiellement pour nous à négliger la structure hyperfine des niveaux de (II.1).

Les énergies atomiques prédites par l'équation de Dirac (II.1) sont représentées dans la figure II.1. On y voit clairement la séparation des énergies en fonction de leur *signe* — pour peu que la charge du noyau ne soit pas si forte que l'énergie totale des électrons devienne négative. Cette

¹Pour satisfaire à la relation relativiste entre quantité de mouvement et énergie, les matrices $\boldsymbol{\alpha}$ sont contraintes par une algèbre dont il existe un nombre infini de représentations. Ainsi, plusieurs choix de matrices $\boldsymbol{\alpha}$ sont possibles ; nous n'aurons cependant pas besoin d'en prendre un particulier.

²L'interprétation de l'opérateur $-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla$ comme une énergie cinétique est en fait délicate (voir par exemple GREINER *et al.* [1985, § 2.4]).

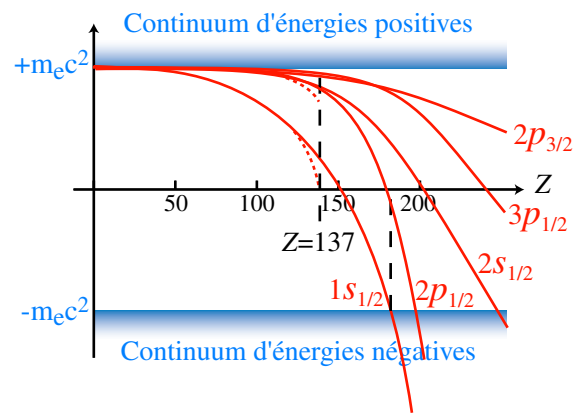


FIG. II.1 – Niveaux d'énergie de Dirac en fonction de la charge du noyau. Les niveaux d'énergies prédits par l'équation de Dirac (II.1) pour un électron ou un positron dans le champ d'un noyau se séparent en *deux groupes* : les états d'énergie *positive* décrivent des *électrons* et ceux d'énergie *négative* des *positrons*. Les traits pleins indiquent les niveaux de Dirac pour un noyau *non ponctuel* et ceux en pointillés pour un noyau ponctuel (les deux niveaux les plus bas n'existent plus au-delà de $Z = 1/\alpha$). On remarque la présence des deux continua d'énergies dûs aux électrons non liés au noyau. (Les notations utilisées pour les états sont détaillées dans la section VI/2.1.)

séparation en deux groupes d'énergies permet, selon l'interprétation de Dirac, de considérer que les états d'énergie positive sont ceux d'un *électron* dans le champ du noyau, et que ceux d'énergie négative sont ceux d'un *positron* (pour une interprétation classique de ces énergies, on peut décider que les positrons ont en fait pour énergie l'*opposé* de l'énergie ε_n prédite par (II.1), afin de rendre cette énergie *positive*, puisque les trois énergies mentionnées ci-dessus sont classiquement positives pour un positron — énergies cinétique, potentielle électrostatique et de masse). Nous utiliserons l'existence de ces deux groupes d'énergie dans la définition du champ quantique de Dirac (II.9), objet fondamental de l'électrodynamique quantique des états liés.

Nous compléterons cette rapide description de l'équation de Dirac dans la section VI/2.1 car nous en aurons besoin lorsque nous aborderons le *calcul numérique* de la self énergie, qui requiert une analyse fine des solutions de (II.1).

Les états stationnaires ϕ_n de (II.1) ne décrivent que des états à *une* particule (électron ou positron) et il est donc nécessaire d'introduire l'espace des états de l'électrodynamique des états liés, qui permet de décrire des systèmes contenant un nombre *quelconque* de particules.

II/1.2-b \diamond Espace des états

.....
 Le vide

L'espace des états de l'électrodynamique quantique des états liés pouvant décrire un système contenant un nombre quelconque de particules, il contient naturellement un état *vide* de tout électron, positron ou photon, que nous notons $|0\rangle$.

Pour les états non vides, nous utiliserons par souci de simplicité une base des états physiquement simple : chaque vecteur de cette base est étiqueté par l'ensemble des états ϕ_n des fermions qu'il contient, comme nous le détaillons ci-dessous, d'abord pour les états à un fermion, puis pour les états à nombre quelconque de particules.

.....
 États une
 particule

Ainsi — et pour nous conformer à l'usage courant — les états contenant *un* fermion seront notés $|n\rangle$, où n est l'étiquette d'un état propre ϕ_n de (II.1).¹ Cette base des états $|n\rangle$ à un fermion est tout simplement ajoutée au vecteur vide $|0\rangle$ pour former un espace plus grand (ce qui se réalise mathématiquement par la *somme directe* des espaces à zéro et à un fermion de Dirac). En l'absence de potentiel électromagnétique extérieur dans l'équation de Dirac (II.1), les états ci-dessus sont les habituels états en *onde plane* de quantité de mouvement fixée (voir par exemple

¹Il n'est pas nécessaire de donner une *représentation explicite* de ces états à un fermion (comme par exemple $|n\rangle = \phi_n$), car les fonctions d'onde de l'équation de Dirac (II.1) sont incorporées ailleurs dans QED : au travers du *champ quantique électronique*, qui contient — comme nous le verrons dans l'Eq. (II.9) — *toutes* les fonctions d'onde de Dirac.

PESKIN and SCHROEDER [1995]).

États à
plusieurs
particules

Pour les états à *plusieurs* fermions, un problème de notation se pose : par exemple, si l'on considère un état à deux électrons n_1 et n_2 , il est naturel de le désigner par $|n_1, n_2\rangle \dots$ ou bien par $|n_2, n_1\rangle$. Comment résoudre ce problème de *notation*, sachant que le caractère indiscernable des particules implique qu'il n'existe qu'un seul état physique contenant les électrons n_1 et n_2 ?

Une solution consisterait à décider d'ordonner les états propres électroniques ϕ_n puis à ne désigner un état à plusieurs particules que par l'*unique* liste *ordonnée* des états à une particule qu'il contient. Cependant, ce choix compliquerait la définition formelle d'opérateurs agissant sur les états à plusieurs particules.

Une autre solution — de loin la plus utilisée — consiste à accepter *plusieurs notations* pour un même état physique, ce qui est pratique pour écrire formellement certaines opérations sur les états, où l'on n'a alors pas à se soucier de l'ordre dans lequel on énumère les états électroniques individuels. Ainsi,

$$|n_1, \dots, n_k\rangle \text{ est l'une des } k! \text{ notations pour un état contenant les particules de Dirac d'états } n_1, \dots, n_k. \quad (\text{II.3})$$

Mais comme deux tels kets ne différant que par l'ordre des états énumérés doivent désigner, à une phase près, le *même* vecteur de l'espace des états, il faut décider de cette phase ; il s'avère pratique¹ de définir cette phase par

$$|n_{\sigma(1)}, \dots, n_{\sigma(k)}\rangle = (-1)^\sigma |n_1, \dots, n_k\rangle, \quad (\text{II.4})$$

pour n'importe quelle permutation σ de l'ordre des électrons n_1, \dots, n_k , et où nous avons noté $(-1)^\sigma$ la *signature* de la permutation² σ .

Espace des
photons

L'espace des états de photons est décrit de manière similaire à celui des électrons et positrons. L'équation d'onde qui remplace l'équation de Dirac (II.1) est aussi une équation relativiste, puisqu'il s'agit de l'*équation de Maxwell* de propagation du 4-potentiel électromagnétique³ *A dans le vide*. Chaque solution de cette équation de propagation sera considérée comme une excitation élémentaire du champ électromagnétique du vide, que l'on nomme « photon ».

¹Comme nous le verrons plus tard dans les équations (II.6), ce choix de phase entre différentes notations d'un même état physique permet d'écrire simplement l'action des opérateurs de *création* de particules sur les états.

²La convention (II.4) impose d'utiliser le *principe d'exclusion de Fermi* aux électrons et positrons : tout état qui contiendrait deux électrons dans le même état devrait être égal à son opposé et serait donc *nul*.

³Ce potentiel électromagnétique qui sert à décrire les photons ne doit pas être confondu avec le potentiel électromagnétique extérieur (d'un noyau, par exemple) que nous avons introduit dans l'équation de Dirac (II.1).

Cependant, le lien entre cette équation d'onde et l'espace des états est compliqué par la partie arbitraire de jauge contenue dans A : il est délicat de séparer les composantes de A qui n'ont aucun impact physique (dépendant de la jauge) de celles qui sont contraintes par l'équation de propagation de Maxwell et qui forment donc les degrés de liberté physiques à quantifier. Ainsi l'espace des états de photons *dépend* de la jauge utilisée pour quantifier le potentiel A [COHEN-TANNOUJDI *et al.* 1987 ; HATFIELD 1992, p. 90]. Il est cependant inutile de rentrer ici dans des détails à ce sujet ; le lecteur intéressé pourra par exemple consulter des références comme COHEN-TANNOUJDI *et al.* [1987], HATFIELD [1992] ou BOGOLIUBOV and SHIRKOV [1980].

.....
 États de
 QED

Les états de l'électrodynamique des états liés sont naturellement l'ensemble des états à nombre quelconque d'électrons, de positrons et de photons que nous venons de décrire. Ainsi, nous pouvons noter la *base* canonique que nous venons de présenter par l'ensemble des états « de Fock » suivants :

$$| \underbrace{n_1, n_2, \dots, n_{k-1}, n_k}_{\text{positrons et électrons}}; \text{photons} \rangle, \quad (\text{II.5})$$

où « photons » désigne l'énumération des photons présents, similaire à celle des états de Dirac (et que nous ne précisons pas par souci de la lisibilité des notations) — à ceci près que les photons ne sont pas contraints par le principe de Pauli à occuper des états différents.

II/1.2-c \diamond **Le champ quantique électronique**

.....
 Création et
 annihilation
 de quanta

Comme nous l'avons indiqué dans la note 1 p. 44, les fonctions d'onde propre de Dirac sont regroupées par QED dans un *unique opérateur* ; celui-ci agit naturellement sur l'espace à nombre quelconque de particules que nous venons de définir. Afin de pouvoir expliciter cet opérateur, introduisons les opérateurs de création et d'annihilation de particules (électrons ou positrons), qui agissent sur le même espace ; nous définissons donc \hat{a}_n^\dagger , qui crée un *électron* dans l'état ϕ_n ($\varepsilon_n > 0$) :

$$\hat{a}_n^\dagger |m_1, m_2, \dots, m_k\rangle \equiv \begin{cases} |n, m_1, m_2, \dots, m_k\rangle & \text{si } n \notin \{m_1, \dots, m_k\} \\ \mathbf{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{II.6a})$$

et $\hat{b}_{n'}^\dagger$, qui crée un *positron* dans l'état $\phi_{n'}$ ($\varepsilon_{n'} < 0$) :

$$\hat{b}_{n'}^\dagger |m_1, m_2, \dots, m_k\rangle \equiv \begin{cases} |n', m_1, m_2, \dots, m_k\rangle & \text{si } n' \notin \{m_1, \dots, m_k\} \\ \mathbf{0} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (\text{II.6b})$$

où $\mathbf{0}$ est le *vecteur nul* de l'espace des états. Comme \hat{a}_n^\dagger et $\hat{b}_{n'}^\dagger$ transforment un état à k particules de Dirac en état à $k + 1$ particules, leurs adjoints \hat{a}_n

et $\hat{b}_{n'}$ transforment eux les états à $k + 1$ particules en états à k particules ; on peut ainsi aisément montrer — à l'aide de la notation (II.4) et de la définition (II.6a) — que

$$\begin{aligned} & \hat{a}_n |m_1, m_2, \dots, m_k\rangle & (II.7) \\ & = \begin{cases} (-1)^{i_0} |m_1, \dots, m_{i_0-1}, m_{i_0+1}, \dots, m_k\rangle & \text{s'il existe un électron } m_{i_0} = n \\ \mathbf{0} & \text{sinon,} \end{cases} \end{aligned}$$

où l'impossibilité d'enlever un électron non présent est exprimée par un résultat éventuellement nul. L'action de $\hat{b}_{n'}$ est similaire puisqu'elle supprime un positron (si cela est possible).

Algèbre de
l'espace de
Fock

Le point de vue que nous avons pris ici nous permet de déduire immédiatement de ce qui précède les célèbres *relations d'anticommutation*¹ entre les opérateurs \hat{a}_n^\dagger , $\hat{b}_{n'}^\dagger$, \hat{a}_n et $\hat{b}_{n'}$:

$$\hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger + \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n = 1 \quad (II.8a)$$

$$\hat{b}_{n'} \hat{b}_{n'}^\dagger + \hat{b}_{n'}^\dagger \hat{b}_{n'} = 1 \quad (II.8b)$$

$$\text{Tous les autres anticommutateurs des } \hat{a}^\dagger, \hat{b}^\dagger, \hat{a} \text{ et } \hat{b} \text{ sont nuls.} \quad (II.8c)$$

L'interprétation en est simple : par exemple (II.8a) indique que si l'on ajoute un électron n puis qu'on le supprime d'un état, ou bien si on commence au contraire par le supprimer avant de le remettre, on ne change pas cet état (l'une des deux opérations donnant un résultat nul et l'autre ne modifiant pas l'état de départ). De son côté, la relation $\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger = 0$ de (II.8c) (avec $n \neq n'$) indique que l'ordre dans lequel on crée des électrons a une influence sur la *phase* de l'état finalement produit (qui change de signe entre un ordre de création et l'autre).² Cette phase aura une grande importance dans l'évaluation des niveaux atomiques.

Maintenant que nous avons introduit ces opérateurs qui permettent de se mouvoir dans les états à plusieurs particules, il devient possible de définir simplement le champ quantique électronique, défini sur le même espace.

¹Nous supposons ici que les électrons et positrons dans un champ stationnaire sont étiquetés par des indices *discrets* ; une façon d'obtenir de tels états consiste à considérer que ces particules sont confinées dans une *boite*, ce qui n'est pas plus irréaliste que de considérer qu'elles sont dans un espace infini et possède l'avantage de ne pas offrir de complications essentiellement inutiles. Cependant, des relations d'anticommutation incluant les états des continua de l'équation de Dirac peuvent être trouvées dans MOHR [1985].

²En mécanique quantique à nombre fixé de particules, l'analogie de cette relation est le comportement du déterminant de Slater, qui change de signe sous l'échange de deux particules.

Champ
quantique
des
électrons et
positrons

La meilleure description des électrons par un champ à valeurs complexes dont nous disposons actuellement est donnée par l'équation de Dirac ; cette équation sert ainsi de fondement au champ quantique électronique dans le « modèle standard » des interactions fondamentales et, partant, dans l'application que nous en faisons ici. Le champ *quantique* électronique est ainsi *lui aussi* solution de l'équation de Dirac et est donc pris comme une combinaison linéaire de *toutes* les solution de l'équation de Dirac [MOHR *et al.* 1998] :

$$\hat{\psi}_I(\mathbf{x}, t) \equiv \sum_{\varepsilon_n > 0} \hat{a}_n \phi_n(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_n t} + \sum_{\varepsilon_n < 0} \hat{b}_n^\dagger \phi_n(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_n t}, \quad (\text{II.9})$$

où les « coefficients » \hat{a} et \hat{b}^\dagger sont les *opérateurs*¹ d'annihilation d'électron et de création de positron décrits ci-dessus ; le symbole \sum utilisé est simplement un raccourci pratique pour indiquer que la sommation est discrète (somme Σ) sur les états discrets et continue (intégration \int) sur les états des continua. Notons dès à présent pour référence qu'il sera pratique de changer la représentation dans laquelle on utilise cet opérateur champ quantique de Dirac ; il s'avérera alors que la définition ci-dessus donne $\hat{\psi}_I$ en *représentation d'interaction* sous le hamiltonien des particules et photons libres que nous présentons plus loin (Eq. (II.12)).

C'est dans ce champ quantique $\hat{\psi}_I$ que réside la différence entre la QED des hautes énergies [PESKIN and SCHROEDER 1995], où les électrons et positrons sont des particules libres (en adéquation avec leur état avant une collision dans un accélérateur) : les fonctions d'onde ϕ_n sont celles d'électrons et positrons dans un champ extérieur, et les opérateurs élémentaires \hat{a}_n et \hat{b}_n^\dagger permettent de se mouvoir simplement dans l'espace de Fock de telles particules (et non dans l'espace des ondes planes).

Cet opérateur $\hat{\psi}_I$ possède un comportement simple vis-à-vis de la *charge* des états de Fock : il effectue la destruction d'un *quantum* de *charge* électronique q_e (II.2) (soit par destruction d'électron, soit par création de positron). Réciproquement, son adjoint $\hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{x}, t)$ à manifestement la propriété

¹Techniquement, le choix de ces coefficients provient de l'adéquation entre les relations d'anticommution (II.8) sur les opérateurs de création et annihilation et l'anticommution entre l'opérateur « position » $\hat{\psi}_I$ et sa quantité de mouvement conjuguée [PESKIN and SCHROEDER 1995].

contraire, à savoir de *créer* une charge électronique. Ces comportements simples rendent ces opérateurs très pratiques pour décrire l'interaction entre particules de Dirac chargées et photons, comme nous le montrons ci-après.

II/1.2-d \diamond Le champ quantique de photons

Tout comme pour les électrons et les positrons, la QED quantifie l'électromagnétisme ; comme le quadri-vecteur *potentiel* électromagnétique A est responsable de l'*énergie* d'interaction entre particules chargées et champ électromagnétique (en particulier au travers d'une énergie électrostatique de la forme $q_e V$), il est souhaitable en QED de choisir de quantifier ce *potentiel* plutôt que les champs électrique et magnétique.

Il existe plusieurs procédures de quantification de ce potentiel A [COHEN-TANNOUJI *et al.* 1987 ; HATFIELD 1992 ; KAKU 1993], liées à des choix de jauge différents. Nous pouvons retenir cependant qu'à l'issue de la quantification du potentiel vecteur A , on obtient tout comme pour les électrons et positrons un

$$\text{champ quantique } \hat{A}(\mathbf{x}, t), \quad (\text{II.10})$$

qui est lui formé de *quatre* opérateurs, notés $\hat{A}^{\mu=0\dots 3}$ et qui décrivent d'une part le potentiel *scalaire* électromagnétique (\hat{A}^0) et d'autre part le potentiel *vecteur* ($\hat{A}^{1\dots 3}$). Quelle que soit la procédure de quantification retenue, plusieurs des quatre composantes sont des champs *similaires au champ quantique électronique* $\hat{\psi}_I$: ces opérateurs détruisent des photons et créent des anti-photons (qui ne sont autres que les photons) par l'intermédiaire d'une définition semblable à celle du champ quantique de Dirac (II.9). C'est par l'intermédiaire de cet opérateur fondamental \hat{A} que la théorie quantique des champs crée et absorbe des photons dans les processus physiques.

II/1.2-e \diamond Le hamiltonien de l'électrodynamique des états liés

Le hamiltonien de l'électrodynamique quantique des états liés est une généralisation de l'énergie totale des champs classiques (à valeurs complexes) des électrons, positrons et potentiel électromagnétique A , où l'on a remplacé les champs classiques par leurs analogues quantifiés [MOHR *et al.* 1998] ; ce hamiltonien exprime donc l'*énergie totale* d'un système composé d'un nombre quelconque d'électrons, positrons et photons et est défini en *représentation d'interaction* comme étant la somme [MOHR *et al.* 1998]

$$\hat{H}_I(t) \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_I^I(t) \quad (\text{II.11})$$

du hamiltonien \hat{H}_0 des électrons, positrons et photons « *libres* » (c'est-à-dire sans interaction entre eux) et du *hamiltonien d'interaction* entre potentiel électromagnétique d'une part et densités de charge et courant de charges de l'autre, notée ici \hat{H}_I^I ; nous définissons ces deux hamiltoniens plus loin.

La représentation d'interaction correspond naturellement à une prise en compte des effets *du hamiltonien libre* \hat{H}_0 , qui décrit l'évolution des électrons, positrons et photons exactement comme s'ils étaient indépendants (c'est-à-dire selon l'équation de Dirac (II.1) et l'équation de Maxwell des potentiels dans le vide). Nous verrons plus loin que la dépendance en temps du hamiltonien total en représentation d'interaction $\hat{H}_I(t)$ ne provient *que* du changement de point de vue offert par cette représentation, puisqu'en représentation *de Schrödinger* le hamiltonien de QED est *indépendant du temps*.

L'énergie
des
particules
libres

L'énergie des électrons, positrons et photons sans interaction s'obtient simplement en additionnant les énergies de toutes les particules présentes dans un état physique (II.5) donné :

$$\begin{aligned} & \hat{H}_0 |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle \\ & \equiv \left(\sum_{i=1}^k |\varepsilon_{n_i}| + (\text{énergie totale des photons libres}) \right) |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle, \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

où l'énergie des photons est simplement la somme des énergies $\hbar\omega$ des photons (ondes électromagnétiques planes) de pulsation ω contenues dans l'état physique indiqué [HATFIELD 1992]. On remarquera que ce hamiltonien donne aux positrons une énergie *positive*, conformément à ce qu'on observe expérimentalement — et contrairement à l'équation de Dirac dont il est en partie issu.

Énergie
d'interac-
tion entre
charges et
photons

Comme le hamiltonien de l'électromagnétisme classique fait intervenir le 4-courant électrique (densités volumique de charges et de courant), il nous faut définir l'*opérateur* correspondant — qui agit sur les états décrits plus haut. Ceci est accompli de façon simple en utilisant la formule bien connue du courant conservé par l'équation de Dirac [PESKIN and SCHROEDER 1995] et qui est un *quadri-vecteur* à valeurs réelles défini à partir de la fonction d'onde $\phi(\mathbf{x}, t)$ d'une particule de Dirac d'une manière souvent notée

$$j^\mu(\mathbf{x}, t) \equiv q_e \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) \gamma^\mu \phi(\mathbf{x}, t), \quad (\text{II.13})$$

où nous avons introduit les matrices γ^μ de Dirac, qui sont très semblables aux matrices β et $\alpha^{i=1,2,3}$ introduites pour l'équation de Dirac p. 42 :

$$\begin{aligned} \gamma^0 & \equiv \beta \\ \gamma^{i=1,2,3} & \equiv \beta \alpha^i, \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

ainsi que l'habituel « *adjoint de Dirac* » d'une fonction d'onde (à quatre composantes) de l'équation de Dirac (II.1) :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) \equiv \phi^\dagger(\mathbf{x}, t) \gamma^0. \quad (\text{II.15})$$

L'électrodynamique quantique des états liés postule grâce à (II.13) que l'opérateur courant de charge doit être défini comme (voir par exemple SCHWEBER [1961, § 13c] et MOHR *et al.* [1998]) :

$$\hat{j}^\mu(\mathbf{x}, t) \equiv q_e \frac{1}{2} [\hat{\bar{\psi}}_I(\mathbf{x}, t), \gamma^\mu \hat{\psi}_I(\mathbf{x}, t)], \quad (\text{II.16})$$

pour lequel nous précisons que l'adjoint de Dirac du champ *quantique* $\hat{\psi}_I$ de (II.9) est une simple généralisation du cas où les \hat{b}_n^\dagger , *etc.* et γ^0 seraient des nombres complexes :

$$\hat{\bar{\psi}}_I(\mathbf{x}, t) = \sum_{\varepsilon_n > 0} \hat{a}_n^\dagger \bar{\phi}_n(\mathbf{x}) e^{+i\varepsilon_n t} + \sum_{\varepsilon_n < 0} \hat{b}_n \bar{\phi}_n(\mathbf{x}) e^{+i\varepsilon_n t}; \quad (\text{II.17})$$

la notation (lourde mais habituelle) du commutateur de (II.16) ne s'applique qu'aux opérateurs de création et annihilation (et non aux fonctions d'onde de Dirac de (II.9) et (II.17))¹ : par exemple

$$[\hat{a}_n^\dagger \bar{\phi}_n(\mathbf{x}) e^{+i\varepsilon_n t}, \gamma^\mu \hat{a}_m \phi_m(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_m t}] \equiv (\bar{\phi}_n(\mathbf{x}) e^{+i\varepsilon_n t}) \gamma^\mu (\phi_m(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_m t}) [\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_m].$$

Maintenant que nous disposons d'une part d'opérateurs (II.16) décrivant la densité de charges et le courant électrique et d'autre part d'un potentiel électromagnétique (II.10), nous pouvons écrire l'énergie d'interaction entre matière chargée et champ électromagnétique. L'*énergie d'interaction* entre charges et photons, en *représentation d'interaction* sous (II.12), est définie par l'électrodynamique des états liés comme [MOHR *et al.* 1998]

$$\hat{H}_I^I(t) \equiv \int d^3\mathbf{y} \hat{H}_I^I(\mathbf{y}, t) \quad (\text{II.18a})$$

où l'opérateur de densité d'énergie qui ressemble au hamiltonien classique donnant les équations de Maxwell² :

$$\hat{H}_I^I(\mathbf{y}, t) \equiv \hat{j}_\mu(\mathbf{y}, t) \left[\hat{A}^\mu(\mathbf{y}, t) + \Phi^\mu(\mathbf{y}) \right] - \delta m \frac{1}{2} [\hat{\bar{\psi}}(\mathbf{y}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] \quad (\text{II.18b})$$

où nous avons introduit par souci de généralité un *potentiel extérieur* $\Phi^\mu(\mathbf{y})$ (qui peut par exemple venir compléter le potentiel externe de (II.1) afin d'inclure l'influence du moment magnétique du noyau et ainsi générer les effets de structure hyperfine, ou bien permettre d'étudier l'effet d'un champ magnétique externe sur les niveaux atomiques); le contre-terme $\delta m \frac{1}{2} [\hat{\bar{\psi}}(\mathbf{y}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)]$ permet d'absorber les divergences apparaissant dans les

¹Sans ce commutateur, la charge du vide $\int d^3\mathbf{x} \langle 0 | \hat{j}^0(\mathbf{x}, t = 0) | 0 \rangle$ ne serait pas nulle. Le commutateur utilisé donne cependant les mêmes prédictions sur les *niveaux d'énergie* qu'un courant défini par $\hat{j}^\mu(\mathbf{x}, t) \equiv q_e \hat{\bar{\psi}}_I(\mathbf{x}, t) \gamma^\mu \hat{\psi}_I(\mathbf{x}, t)$ (voir MOHR *et al.* [1998, § 2.3]).

²On y reconnaît en particulier un terme de la forme $\hat{j}_0(\mathbf{y}, t) \hat{A}^0(\mathbf{y}, t)$, *i. e.* la densité de charges multipliée par le potentiel scalaire, noté classiquement ρV .

calculs en ajoutant à la masse des électrons et positrons la quantité δm , qui compense la masse infinie de ces particules lorsqu'elles sont dans la situation hypothétique où elles ne subissent pas d'interaction.

Les champs quantiques (II.9) et (II.10) de l'électrodynamique des états liés dépendent du temps. Pour le champ quantique de Dirac (II.9), cette dépendance en temps provient d'une description des électrons qui ne prend *pas* en compte leur interaction avec le champ électromagnétique des photons — puisque seul le potentiel externe V de l'équation de Dirac (II.1) dicte leur dynamique. De façon similaire, le champ quantique (II.10) des photons n'est construit qu'à partir d'ondes électromagnétiques *dans le vide*. En conséquence, il n'est pas étonnant que les opérateurs courant (II.16) et hamiltonien d'interaction (II.18b) que nous avons obtenus soient en *représentation d'interaction*, où ils évoluent librement sous le hamiltonien \hat{H}_0 de particules indépendantes (II.12). Nous allons cependant voir plus loin que le hamiltonien d'interaction (II.18a) est *indépendant du temps*, si on le considère en représentation de Schrödinger.

Nous étudions dans la suite quelques conséquences sur les niveaux atomiques de l'interaction (II.18b), qui est une version quantifiée du hamiltonien des équations de Maxwell avec un courant de charges créé par des électrons et positrons de Dirac.

II/1.3

Les atomes selon QED

Nous nous proposons ici de regarder l'énergie d'interaction (II.18b) d'un peu plus près afin de répondre (partiellement) à la question : qu'est-ce qu'un atome dans ce formalisme où le nombre de particules d'un état physique n'est *pas fixé* ?

II/1.3-a \diamond Introduction

Nous allons voir que dans le formalisme de l'électrodynamique quantique des états liés, un atome ne peut *pas* être décrit par une superposition d'états de Fock (II.5) contenant un nombre donné d'électrons — en contraste avec l'étude des atomes par une théorie sans seconde quantification, comme par exemple l'équation de Schrödinger appliquée à l'atome d'hélium, où l'on utilise des fonctions d'onde à exactement *deux électrons*. Nous allons voir qu'un atome à N électrons peut par contre être décrit par l'électrodynamique des états liés comme une superposition d'états de Fock (II.5) contenant N électrons et un nombre quelconque de photons et de paires électron-positron. En d'autres termes, nous remarquerons que les états stationnaires d'un atome à N électrons se trouvent dans l'électrodynamique quantique des états liés sous la forme des états propres *de charge* Nq_e du hamiltonien de la théorie.

Pour arriver à cette conclusion, il nous faut étudier le lien entre la notion de niveau atomique et le hamiltonien (II.11) de l'électrodynamique quantique des états liés. Nous allons donc tout d'abord ramener ce hamiltonien à la représentation *de Schrödinger*, ce qui nous fournira un hamiltonien *indépendant du temps* dont les énergies propres peuvent naturellement s'interpréter comme donnant les niveaux atomiques.

II/1.3-b \diamond **Hamiltonien en représentation de Schrödinger**

.....
 Définition Le hamiltonien d'interaction $\hat{H}_I^I(t)$ de (II.18a) se transforme par définition en représentation de Schrödinger en l'opérateur \hat{H}_S^I de la façon suivante :

$$\hat{H}_S^I(t) \equiv e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{H}_I^I(t) e^{i\hat{H}_0 t}, \quad (\text{II.19})$$

où nous avons indiqué la possible dépendance en temps de l'interaction entre charges et photons. Comme le hamiltonien \hat{H}_0 des charges et photons libres (II.12) agit *séparément* sur les particules de Dirac et les photons, nous pouvons regarder en détail la façon dont les opérateurs sur les *électrons et positrons* sont modifiés sous (II.19) (le cas des photons sera semblable).

.....
 Opérateurs de création et d'annihilation Regardons en détail l'action des facteurs de changement de représentation dans (II.19). Dans l'interaction \hat{H}_I^I de (II.18b), les seuls opérateurs sur les électrons et positrons sont les opérateurs élémentaires de création et annihilation de particules de Dirac (Eqs. (II.16), (II.17) et (II.9)), si bien que le calcul de (II.19) est relativement simple. D'autre part, les *produits* de tels opérateurs apparaissant dans le hamiltonien (II.18b) (au travers par exemple du courant (II.16)) évoluent en représentation de Schrödinger d'une façon qui se déduit directement de l'évolution des opérateurs *élémentaires* $\hat{a}_n^\dagger, \hat{b}_m^\dagger, \text{etc.}$, en vertu du mécanisme de factorisation suivant :

$$e^{-i\hat{H}_0 t} (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}) e^{i\hat{H}_0 t} = \left(e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{a}_n^\dagger e^{i\hat{H}_0 t} \right) \left(e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{a}_{n'} e^{i\hat{H}_0 t} \right) \quad (\text{II.20})$$

(et de même pour n'importe quel produit d'opérateurs quelconques sur l'espace de Fock).

La situation est similaire pour les photons, si bien qu'obtenir le hamiltonien d'interaction \hat{H}_S^I dans la représentation de Schrödinger (II.19) se ramène simplement à faire passer les opérateurs d'annihilation et de création de quanta contenus dans \hat{H}_I^I (II.18b) de la représentation d'interaction à celle de Schrödinger. Regardons par exemple le cas de la création d'un électron dans un état n : il nous faut évaluer

$$\left(e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{a}_n^\dagger e^{i\hat{H}_0 t} \right), \quad (\text{II.21})$$

ce que nous allons faire en considérant l'action successive des trois opérateurs, afin de mettre en lumière le mécanisme en jeu dans l'expression ci-dessus. D'après la définition (II.6a) de \hat{a}_n^\dagger , cela se fait simplement en

travaillant dans la base des états (II.5); ainsi, pour tout état de Fock

$$|n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle$$

dont on étiquette les électrons et positrons par n_1, \dots, n_k et où « photons » désigne la liste des photons présents, l'action du hamiltonien libre \hat{H}_0 donne simplement d'après (II.12) l'énergie totale des particules considérées comme indépendantes :

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}_0 t} |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle & \quad (II.22) \\ = e^{i(|\varepsilon_{n_1}| + \dots + |\varepsilon_{n_k}| + \text{énergie des photons})} |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle. \end{aligned}$$

L'action de \hat{a}_n^\dagger sur l'état de Fock ci-dessus est simple, d'après (II.6a) :

$$\begin{aligned} \hat{a}_n^\dagger e^{i\hat{H}_0 t} |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle & \quad (II.23) \\ = \begin{cases} e^{i(|\varepsilon_{n_1}| + \dots + |\varepsilon_{n_k}| + \text{énergie des photons})} |n, n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle \\ \quad \text{si } n \notin \{n_1, \dots, n_k\} \\ \mathbf{0} \text{ sinon.} \end{cases} \end{aligned}$$

Enfin, l'application de l'opérateur d'évolution libre $\exp(-i\hat{H}_0 t)$ sur (II.23) fait sortir de façon similaire à (II.22) l'énergie totale de l'état *avec une particule de Dirac n supplémentaire*, si bien que seule subsiste l'énergie de cet état n , l'énergie de toutes les autres quanta de (II.23) disparaissant par compensation entre $\exp(-i\hat{H}_0 t)$ et $\exp(i\hat{H}_0 t)$:

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{a}_n^\dagger e^{i\hat{H}_0 t} |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle & \\ = \begin{cases} e^{-i|\varepsilon_n| t} |n, n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle \\ \quad \text{si } n \notin \{n_1, \dots, n_k\} \\ \mathbf{0} \text{ sinon.} \end{cases} & \\ = e^{-i\varepsilon_n t} \hat{a}_n^\dagger |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle. & \end{aligned}$$

Ainsi, le passage du schéma d'interaction pour \hat{a}_n^\dagger au schéma de Schrödinger (II.21) s'obtient simplement par le remplacement

$$\hat{a}_n^\dagger \rightarrow e^{-i\varepsilon_n t} \hat{a}_n^\dagger. \quad (II.24)$$

Les autres opérateurs ne sont pas plus compliqués à faire passer de la première représentation à la seconde; on trouve ainsi

$$\hat{b}_m^\dagger \rightarrow e^{i\varepsilon_m t} \hat{b}_m^\dagger, \quad \hat{a}_n \rightarrow e^{i\varepsilon_n t} \hat{a}_n, \quad \hat{b}_m \rightarrow e^{-i\varepsilon_m t} \hat{b}_m.$$

.....
Hamiltonien
en représen-
tation de
Schrödinger

Conformément à notre discussion autour de (II.20), le hamiltonien (II.19) s'obtient directement en effectuant dans l'interaction \hat{H}_I^1 de (II.18b) les remplacements ci-dessus (ainsi que ceux pour les photons, qui sont similaires).

Comme les créations et destruction de fermions de Dirac viennent toutes des champs quantiques de Dirac $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\bar{\psi}}_I$ de (II.9) et (II.17), l'effet net du changement de représentation (II.19) vient *exactement compenser* les évolutions des états propres de Dirac contenus dans ces champs quantiques ; par exemple le champ $\hat{\psi}_I$ de (II.9) est *constant en représentation de Schrödinger* et vaut :

$$\sum_{\varepsilon_n > 0} \hat{a}_n \phi_n(\mathbf{x}) + \sum_{\varepsilon_n < 0} \hat{b}_n^\dagger \phi_n(\mathbf{x}) = \hat{\psi}_I(\mathbf{x}, t = 0) \equiv \hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad (\text{II.25})$$

où les sommes se font toujours sur les états propres électroniques et positroniques de l'équation de Dirac. Comme indiqué ci-dessus, le champ quantique de Dirac en représentation de *Schrödinger* s'obtient immédiatement en *fixant le temps* à $t = 0$ dans ce champ en représentation d'*interaction*, si bien qu'en admettant que le fait que la situation est similaire pour les photons, nous obtenons le

$$\text{hamiltonien d'interaction en représentation de } \textit{Schrödinger} : \quad (\text{II.26}) \\ \hat{H}_S^I = \hat{H}_I^I(t = 0),$$

où l'interaction en représentation d'interaction $\hat{H}_I^I(t)$ est définie dans l'Eq. (II.18a).

Ainsi, la transformation du hamiltonien de l'électrodynamique quantique des états liés (II.11) en représentation de *Schrödinger* donne un hamiltonien *total constant* :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_S^I, \quad (\text{II.27})$$

somme du hamiltonien des particules libres \hat{H}_0 (II.12) et de l'interaction (II.26). Cette disparition de la dépendance en temps de (II.11) par changement de représentation était souhaitable, puisque l'on tombe dans une situation similaire à celle du traitement des atomes en mécanique « classique » (à nombre fixé de particules), où ceux-ci sont décrits par un hamiltonien constant.

II/1.3-c \diamond Atomes et électrons selon QED

Nous sommes donc en présence d'un hamiltonien (II.27) décrivant l'énergie totale de n'importe quel système de charges soumis d'une part à l'interaction électromagnétique et d'autre part à un potentiel extérieur (représentant par exemple l'effet classique d'un noyau immobile). Ce hamiltonien est hermitien, tout comme celui utilisé habituellement en mécanique quantique non relativiste.¹ *Ses états propres représentent donc naturellement les états stationnaires atomiques* [MOHR *et al.* 1998], dont l'énergie

¹L'hermiticité de (II.27) provient de celle, évidente, de \hat{H}_0 (II.12) et de celle de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) ; l'hermiticité de \hat{H}_S^I peut être démontrée à partir de la définition (II.18b) de l'interaction, en utilisant en particulier le caractère hermitien des champs \hat{A}^μ (II.10) et des matrices de Dirac α^μ .

est la somme d'une énergie venant de particules sans interaction dans le potentiel extérieur (\hat{H}_0) et d'autre part du couplage entre charges et photons (\hat{H}_S^I).

Cependant, en mécanique quantique « classique », les atomes et molécules sont traités en utilisant un hamiltonien qui agit sur une fonction d'onde à nombre *fixé* de particules (par exemple deux électrons pour l'atome d'hélium, *etc.*); au contraire, ici, le hamiltonien \hat{H} de (II.27) agit sur des états à nombre *quelconque* de particules. Comment, donc, est par exemple décrit l'atome d'hélium dans ce formalisme que nous venons de présenter ?

Charge fixée

Nous proposons une réponse simple à cette question : les énergies de l'atome d'hélium sont données par les états propres de \hat{H} sur les états de charge totale $2q_e$ (et de même pour les autres atomes et ions). Pour qu'un état puisse à la fois être de *charge* et d'*énergie* fixées, il est nécessaire (et suffisant) que le hamiltonien total (II.27) ne modifie pas la charge des états de Fock. Montrons que cette condition est satisfaite.

Pour montrer que \hat{H} conserve la charge des états (de charge donnée), il est pratique d'employer la base simple (II.5) que nous avons présentée p. 46, puisque la charge des états qu'elle contient est *fixée* :

$$\begin{aligned} & \text{la charge de } |n_1, \dots, n_k; \text{photons}\rangle \text{ est} \\ & q_e \times (\text{nombre d'électrons dans } n_1, \dots, n_k \\ & \quad - \text{nombre de positrons dans } n_1, \dots, n_k). \end{aligned}$$

La charge d'un tel état n'est modifiée ni par \hat{H}_0 ni par l'interaction \hat{H}_S^I , car : (a) L'énergie \hat{H}_0 (II.12) des particules sans interaction multiplie simplement chaque état de la base (II.5) par son énergie, si bien que sa charge n'est pas changée. (b) Les changements de charge éventuels dûs à l'interaction \hat{H}_S^I de l'Eq. (II.26) ne peuvent provenir que des champs quantiques de Dirac $\hat{\psi}$ et $\hat{\bar{\psi}}$ contenus dans l'interaction (II.18b), en particulier au travers du courant \hat{j} (II.16) (les créations et destructions de photons ne modifient pas la charge des états) ; or il se trouve que le champ quantique de Dirac modifie de façon très simple la charge d'un état, comme le montrent directement les définitions (II.9) et (II.17) : tout état de Fock (II.5) (donc de charge fixée) est tel que

- sa charge diminue de q_e sous l'action de $\hat{\psi}$ (par destruction d'électron par \hat{a}_n ou par création de positron par \hat{b}_n^\dagger),
- sa charge augmente de q_e sous l'action de $\hat{\bar{\psi}}$ (par création d'électron par \hat{a}_n^\dagger ou destruction de positron par \hat{b}_n).

Le fait que les champs quantiques $\hat{\psi}$ et $\hat{\bar{\psi}}$ apparaissent toujours par *paire* dans l'interaction \hat{H}_S^I (II.18b) fait que l'interaction (II.26) *ne change pas la charge des états*.

Nous venons ainsi de prouver que l'on peut chercher les états propres du hamiltonien \hat{H} (II.27) de l'électrodynamique des états liés dans chaque

sous-espace de Fock correspondant aux états de charge donnée.

Nombre
d'électrons
non fixé

Afin de mieux cerner l'image de l'atome que propose l'électrodynamique quantique, nous pouvons mentionner une importante différence qu'elle montre lorsqu'on la compare au traitement des atomes en mécanique quantique à nombre fixé d'électrons [COHEN-TANNOUJDI *et al.* 1977, chapitre XIV] : bien que les états atomiques stationnaires soient des états de charge fixée, ils ne sont *pas* composés d'états (II.5) de nombre d'électrons (de Dirac) *fixé* ; précisément, nous signifions par là qu'aucune combinaison linéaire des états de Fock de (II.5) à nombre donné N d'électrons (sans positron ni photon) ne peut décrire un atome *réel* à N électrons, à cause de la création de photons et de paires électron-positron (de Dirac).

En effet, l'évolution de tout état de Fock $|\psi\rangle$ est soumise à l'équation de Schrödinger déduite du hamiltonien (II.27) de la théorie :

$$i\hbar(d|\psi\rangle) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_S^I)|\psi\rangle dt, \quad (\text{II.28})$$

où l'interaction \hat{H}_S^I *ajoute un photon* aux états qui n'en contiennent pas, d'après sa définition ((II.26) et (II.18b)) et le résultat de la quantification du potentiel vecteur A (II.10). Ainsi selon QED, tout état atomique stationnaire *doit* contenir des photons. De la même manière, on peut montrer que l'évolution (II.28) impose que tout état $|\psi\rangle$ superposition d'états contenant un nombre donné N d'électrons doit posséder au bout d'un temps dt des états à $N + 2$ particules formés par l'ajout d'une paire électron-positron [COHEN-TANNOUJDI *et al.* 1987, p. 421].

Ainsi, considérer qu'un atome à N électrons (physiques) peut être décrit par une fonction d'onde à N électrons (de Dirac) est une *approximation* ; cependant, cette approximation est très bonne dans de nombreux cas, d'autant plus qu'elle permet malgré tout d'inclure certains effets dus à QED dans un traitement utilisant de telles fonctions d'onde : il est par exemple possible d'inclure les effets de QED grâce à l'inclusion de tous les phénomènes où les particules émises sont finalement réabsorbées, si bien que le nombre de particules de chaque espèce ne varie pas (« no-pair hamiltonian » [SUCHER 1980]) ; ou bien l'on peut négliger le couplage électromagnétique entre états contenant un nombre différent d'électrons, grâce à la prise en compte du fait que créer deux particules est rendu peu probable par la nécessité d'apporter au moins leur énergie de masse [COHEN-TANNOUJDI *et al.* 1987, B_V.2.b].

SECTION 2 (Chapitre II)

Niveaux atomiques par QED

Le hamiltonien (II.27) de l'électrodynamique des états liés possède un spectre qui représente l'ensemble des prédictions de QED pour les niveaux d'énergie de n'importe quel atome ou ion possédant un noyau donné. Il reste

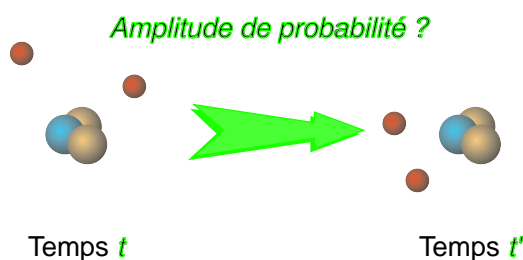


FIG. II.2 – *Propagation de particules de Dirac*. Les niveaux d'énergies prédits par QED se déduisent de l'étude de l'évolutions d'un atome entre deux temps.

à en extraire des expressions analytiques pour les déplacements de niveaux atomiques particuliers. L'idée initiale des méthodes destinées à obtenir de telles formules consiste à utiliser le fait que l'opérateur d'évolution d'un système quantique contient son hamiltonien, si bien que l'étude générale de la *dynamique* de ce système peut permettre d'accéder à ses énergies propres (voir figure II.2) — utiliser la théorie des perturbations pour calculer l'effet de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) directement sous sa forme de Rayleigh-Schrödinger [LINDGREN and MORRISON 1986, Chap. 9] devient rapidement lourd et d'autres techniques doivent être employées (*cf.* section III/3).

Les possibilités offertes par de telles méthodes diffèrent, si bien que nous allons présenter rapidement les caractéristiques des trois principales voies¹ utilisées actuellement, en terminant par la méthode que nous présentons et développons dans cette thèse.

II/2.1

La méthode de Gell-Mann–Low–Sucher

La plus ancienne méthode d'obtention de formules analytiques [GELL-MANN and LOW 1951 ; SUCHER 1957] pour les niveaux d'énergie d'un atome à partir du hamiltonien (II.27) n'est pas la plus pratique à mettre en œuvre. Elle reste cependant largement utilisée [BEIER *et al.* 2000 ; SAPIRSTEIN 1998 ; MOHR *et al.* 1998 ; SUNNERGREN 1998 ; BLUNDELL *et al.* 1997 ; LABZOWSKY *et al.* 1993]. En effet, la méthode de SHABAEV [1990a], apparemment plus puissante, a souffert d'une présentation à notre avis incomplète qui en a freiné l'usage².

¹Nous pouvons aussi mentionner le travail de YENNIE [1989], qui n'a apparemment pas reçu de suite. La méthode qu'il propose est essentiellement la méthode de la fonction de Green à deux temps que nous présentons dans cette thèse, mais restreinte au calcul de l'énergie de niveaux *isolés*, et encombrée d'un formalisme peu pratique.

²La méthode de Gell-Mann–Low–Sucher a en particulier permis d'obtenir pour la première fois des formules pour la contribution des diagrammes d'échange de deux pho-

Dans la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher, l'évolution d'un niveau atomique est étudiée entre deux temps *infinis* (*i. e.*, $t = -\infty$ et $t' = +\infty$ dans la figure II.2), avec une interaction électron-photon branchée puis débranchée progressivement (« adiabatiquement ») — en d'autres termes, la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher est fondée sur la « matrice S adiabatique », où l'intensité de l'interaction varie exponentiellement avec le temps, avec un maximum à un instant donné, avant de retourner exponentiellement vers zéro [MOHR *et al.* 1998 ; MOHR 1989, 1985].

Cette méthode a de multiples désavantages. D'un point de vue pratique, le branchement adiabatique de l'interaction électro-magnétique impose un hamiltonien *dépendant du temps* qui *ruine les conservations d'énergie* ; ainsi, les diagrammes de Feynman servant à calculer les niveaux atomiques ne possèdent pas de conservations exactes de l'énergie en leurs points d'interaction, ce qui complique les calculs¹. D'autre part, la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher ne permet pas de calculer les déplacements dus à QED pour des niveaux quasi-dégénérés, alors que nous avons vu l'importance d'un tel résultat pour l'hélium (p. 30). D'autres désavantages de cette méthode peuvent être trouvés dans certains articles [YEROKHIN and SHABAEV 1996b] et l'on comprend que l'absence de liberté imposée par le choix de temps fixés à l'infini peut être une grande contrainte.

II/2.2

La méthode de l'opérateur d'évolution covariant

Une meilleure méthode est en développement depuis peu de temps [LINDGREN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001] ; elle manipule un objet plus puissant que la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher puisque l'évolution atomique de la figure II.2 se fait entre $t = -\infty$ et un temps t' *arbitraire*. Son intérêt réside dans l'utilisation d'un formalisme proche de celui des méthodes d'étude relativiste du problème de plusieurs corps en interaction électromagnétique — *Relativistic Many-Body Perturbation Theory* (RMBPT) [YNNERMAN *et al.* 1994] —, ce qui pourrait permettre de traiter efficacement la contribution de QED aux spectres atomiques en utilisant les techniques développées dans RMBPT pour calculer le gros des contributions liées à l'interaction électromagnétique, tout en y ajoutant de manière systématique les corrections dues à QED.

tons [BLUNDELL *et al.* 1993] entre les électrons des héliumoïdes — confirmées plus tard [SHABAEV and FOKEEVA 1994 ; LINDGREN *et al.* 1995].

¹Certains calculs théoriques effectués par la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher ne nous semblent ainsi pas suffisamment justifiés — même si très probablement justes —, comme par exemple le passage des équations (2.18) à (2.21) dans BLUNDELL *et al.* [1993].

La méthode de la fonction de Green à deux temps

La méthode de la fonction de Green à deux temps s'inspire de travaux (le plus souvent en Russe) sur l'usage de fonctions de Green pour les atomes relativistes [BRAUN and SHIROKOV 1977 ; FELDMAN and FULTON 1987 ; BRAUN *et al.* 1984]. Elle manipule l'objet le plus souple des quatre méthodes présentées ici, puisque les temps entre lesquels l'atome est étudié (*cf.* figure II.2) peuvent prendre *n'importe quelles valeurs*.

Cette méthode ne souffre pas des inconvénients mentionnés ci-dessus pour les méthodes de Gell-Mann–Low–Sucher ou de l'opérateur d'évolution, ce qui lui permet en particulier d'extraire de QED les énergies de niveaux quasi-dégénérés (comme par exemple les niveaux $1s2p\ ^3P_1$ et $1s2p\ ^1P_1$ de l'hélium). Elle permet de calculer les déplacements atomiques dus à QED, mais aussi des probabilités de transition entre niveaux [SHABAEV 1988c], la forme des raies spectrales [SHABAEV 1991], des taux de recombinaison électron-noyau [SHABAEV 1994] et l'influence du mouvement du noyau sur les niveaux électroniques [SHABAEV 1998 ; ARTEMYEV *et al.* 1995b ; SHABAEV 1988a].

Malgré ces avantages, la méthode de la fonction de Green à deux temps a peu fait d'émules : jusqu'à très récemment [LE BIGOT *et al.* 2001b ; LE BIGOT and INDELICATO 2001 ; LE BIGOT *et al.* 2001c], seuls l'auteur de la méthode [SHABAEV 1988b,c] et ses élèves [YEROKHIN and SHABAEV 1995 ; ARTEMYEV *et al.* 1995b] semblent l'avoir utilisée. Cette situation est due en partie à l'usage de la langue russe pour les premières publications [SHABAEV 1988b,c] ; mais ni les traductions des articles fondateurs [SHABAEV 1990a,b], ni les articles d'applications qui ont suivi durant les douze dernières années n'ont réussi à répandre une méthode pourtant performante. Cette situation provient à notre avis de deux difficultés : d'une part les articles publiés présentent la méthode de façon incomplète (règles de Feynman définies partiellement [SHABAEV 1994], exposition très succincte des principes, questions fondamentales laissées ouvertes — *cf.* section III/6) ; d'autre part, les calculs concrets de formules pour les déplacements en énergie qui sont publiés sont à chaque fois *ad hoc*.

Ainsi, nous avons décidé d'une part de présenter la méthode en détail et sous un jour nouveau, ce que nous faisons dans le chapitre III. Après avoir souligné dans la section III/6 certains problèmes fondamentaux soulevés par les articles publiés — liés aux propriétés analytiques de la fonction de Green —, j'y propose une solution dans le chapitre IV. En particulier, je développe dans la section IV/3 un procédé *systématique* qui permet d'obtenir le hamiltonien effectif de la méthode de la fonction de Green à deux temps (qui donne les prédictions de QED pour les niveaux atomiques), procédé qui possède l'avantage de permettre de mener l'ensemble des cal-

culs *graphiquement*. La méthode de la fonction de Green à deux temps, complétée par ces détails théoriques et pratiques, permet à notre avis d'obtenir relativement facilement les formules analytiques qui servent de base aux évaluations numériques des niveaux atomiques dans les atomes et ions à quelques électrons.

CHAPITRE III

Niveaux atomiques par la fonction de Green à deux temps : bases

Sommaire

III/1	Présentation	65
III/2	La fonctions de Green en énergie	65
III/2.1	Propagateur ou fonction de Green à deux temps	66
III/2.2	Fonction de Green en énergie	69
III/2.3	Structure analytique de la fonction de Green . .	71
III/2.3-a	Développement en temps du propagateur	72
III/2.3-b	Structure formelle	74
III/2.3-c	Structure analytique	77
III/2.4	De la fonction de Green aux énergies atomiques	80
III/3	Calcul perturbatif du propagateur à N particules . .	83
III/3.1	Développement du propagateur	83
III/3.2	Opérateur chronologique	84
III/3.3	Théorème de Wick	85
III/4	Le hamiltonien effectif	89
III/4.1	Éléments de matrice de la fonction de Green . .	89
III/4.1-a	Principe de la restriction de la fonction de Green	89
III/4.1-b	Restriction dans le cas non perturbé	89
III/4.1-c	Restriction dans le cas avec interaction	93
III/4.2	Hamiltonien effectif	94
III/4.2-a	Définition du hamiltonien effectif	95
III/4.2-b	Construction du hamiltonien effectif	96
III/5	Règles de Feynman	102
III/5.1	Développement perturbatif du hamiltonien . . .	102
III/5.2	Règles de Feynman	104
III/5.2-a	Plan	104
III/5.2-b	Introduction	104
III/5.2-c	Liste des processus physiques	105

CHAPITRE III. NIVEAUX ATOMIQUES PAR LA FONCTION DE GREEN À DEUX TEMPS...

III/5.2-d	Tables des règles de Feynman	108
III/5.2-e	Exemple : la self énergie écrantée	113
III/6	Conclusion : des difficultés subsistent	116

Présentation

Nous présentons dans ce chapitre une introduction à la méthode dite « de la fonction de Green à deux temps » et à son application au calcul de niveaux d'énergie atomiques par la théorie des champs. Nous renvoyons le lecteur intéressé par les autres utilisations de cette méthode à la physique atomique aux références mentionnées plus haut (p. 60).

Je propose dans ce chapitre une description de la méthode plus détaillée que celles actuellement disponibles [SHABAEV 2002, 2000 ; SHABAEV and FOKEEVA 1994]. J'introduis ainsi dans les sections qui suivent une forme très *explicite* de la méthode, au travers d'un formalisme que j'ai simplifié, tout en essayant de commenter par des arguments intuitifs ses résultats formels.

À notre connaissance, plusieurs points fondamentaux sont cependant absents des articles publiés jusqu'à maintenant sur l'application de la méthode de la fonction de Green à deux temps au calcul de niveaux d'énergie (voir la section III/6 ci-après), si bien qu'il s'avérera nécessaire de compléter ce chapitre. Ainsi, après y avoir donné ce qui est essentiellement une version simplifiée, commentée et explicite de la méthode telle qu'elle est publiée, nous consacrons le suivant aux *calculs concrets* que l'on peut mener avec. Nous étudierons ainsi dans le chapitre IV les fondements théoriques et pratiques des évaluations *perturbatives* (*i. e.* par diagrammes de Feynman) des niveaux d'énergie par la méthode de la fonction de Green à deux temps ; j'y présenterai d'une part les résultats théoriques que j'ai obtenus et qui justifient entièrement la méthode, et d'autre part un procédé systématique que j'ai développé afin d'effectuer relativement aisément toutes les évaluations formelles des niveaux prédits par QED pour les niveaux atomiques.

La fonctions de Green en énergie

Comme indiqué p. 60, les énergies d'un atome à N électrons se retrouvent naturellement dans l'étude de la propagation de N électrons (ou positrons) entre deux temps t et t' . Nous commençons donc par présenter l'objet mathématique associé : le « *propagateur* » ou « fonction de Green à deux temps ». ¹ Nous verrons ensuite qu'une *transformée de Fourier* du pro-

¹Notons que dans la méthode historiquement la plus utilisée pour exprimer les niveaux atomiques prédits par QED, la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher [SUCHER 1957], la propagation des électrons atomiques est représentée par un objet *différent* : l'*opérateur d'évolution* associé au hamiltonien (II.27) de l'électrodynamique des états liés. Contrairement au propagateur qui nous intéresse ici, l'opérateur d'évolution n'est pas spécifiquement attaché à la propagation d'un nombre *fixé* de particules.

pagateur entre deux temps permet de construire une fonction d'une *énergie* — la fonction de Green en énergie — qui donne par ses *singularités* la position des niveaux atomiques [LOGUNOV and TAVKHELIDZE 1963 ; FAUSTOV 1970 ; YENNIE 1989]. Afin de pouvoir obtenir la position exacte de ces singularités (*i. e.* les énergies atomiques), il est utile d'étendre la fonction de Green en énergie à des énergies *complexes* et nous discuterons ainsi finalement des propriétés analytiques de cette fonction.

III/2.1

Propagateur ou fonction de Green à deux temps

Nous motivons d'abord assez informellement la définition du *propagateur* à N *particules*, qui donne l'amplitude quantique de propagation de N électrons ou de N positrons entre deux temps. Nous en donnons ensuite la définition exacte (III.5) utilisée dans la méthode de la fonction de Green.

.....
 Création
 d'électrons
 et de
 positrons

Pour définir la façon dont les particules se propagent, il est utile de pouvoir, à un instant t , créer ou détruire un électron ou un positron disposé à une position \mathbf{x} .¹ Intéressons-nous par exemple au cas de la création d'un positron. Le champ quantique (II.25) contient bien des opérateurs de création de positrons, mais ce champ ne dépend *pas* du temps. Afin d'inclure un temps t de création d'un positron dans le champ quantique (II.25), il suffit de considérer cet opérateur en représentation de *Heisenberg*. Ainsi fait-on apparaître un temps t , mais aussi prend-t-on en compte l'*interaction électromagnétique* (II.18a) que doivent subir les particules chargées [HATFIELD 1992, p. 72] — ce que ne nous offre pas le champ (II.9), qui est en représentation d'interaction.

Ainsi, un positron à la position \mathbf{x} et à l'instant t est créé en l'ajoutant au vide par application du champ quantique (en représentation de Heisenberg)

$$\hat{\psi}_H(\mathbf{x}, t) \equiv e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t} \tag{III.1}$$

évoluant sous le hamiltonien de l'électrodynamique des états liés (II.27) à partir du champ en représentation de Schrödinger (II.25).² Comme nous nous intéressons à la propagation *sous le hamiltonien \hat{H} (II.27) de QED*, un positron est créé par (III.1) à partir du *vide de \hat{H}* , noté $|\Omega\rangle$, qui est défini comme l'état de plus basse énergie de \hat{H} (donc sans aucune particule réelle)

¹En réalité, on ne sait pas comment définir une particule localisée en théorie des champs — *i. e.* une particule qui posséderait un certain nombre de propriétés que l'on attend d'un tel objet physique. Voir par exemple à ce sujet TELLER [1995, p. 85]. Cependant, nous considérerons abusivement, afin de fixer les idées, que le champ quantique (III.1) crée une telle particule (suivant par là l'usage courant).

²Le hamiltonien \hat{H} agissant sur l'espace de Fock, les exponentielles de l'évolution (III.1) n'effectent bien sûr que les opérateurs de création et d'annihilation du champ (II.25) et non les fonctions d'onde qu'il contient.

— que l'on supposera par ailleurs *nulle par construction de \hat{H}* . D'autre part, comme cet état est celui de plus basse énergie, il est compréhensible qu'il ne contienne aucune particule¹ et soit ainsi de *charge nulle*.

.....
 Amplitude
 de
 propagation

L'amplitude quantique de propagation de N positrons entre les positions $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ à l'instant t et les positions $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$ à l'instant t' s'obtient ainsi en créant d'abord un état à N positrons à l'instant t :

$$\hat{\psi}_H^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, t) \cdots \hat{\psi}_H^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N, t) |\Omega\rangle, \quad (\text{III.2})$$

où nous avons indiqué pour chaque champ l'une de ses quatre composantes $\alpha_i = 1, \dots, 4$ — les N positrons étant décrits par l'*ensemble* de tous les choix possibles de composantes²; l'amplitude de propagation s'obtient alors par produit scalaire à $t' > t$ avec l'état final composé de positrons aux positions $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$:

$$\langle \Omega | [\hat{\psi}_{H\alpha'_N}^\dagger(\mathbf{x}'_N, t') \cdots \hat{\psi}_{H\alpha'_1}^\dagger(\mathbf{x}'_1, t')] [\hat{\psi}_H^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, t) \cdots \hat{\psi}_H^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N, t)] | \Omega \rangle. \quad (\text{III.3})$$

L'amplitude de propagation de N électrons possède une expression analogue, à ceci près que la création d'électrons s'obtient d'après l'expression (II.25) en faisant agir sur le vide le champ *conjugué* $\hat{\psi}_H^\dagger$ de (III.1), puisque celui-ci contient les opérateurs \hat{a}_n^\dagger de création d'électrons [HATFIELD 1992, p. 52].

La définition conventionnelle [PESKIN and SCHROEDER 1995] du propagateur entre les temps t et t' est une *généralisation* de (III.3) qui donne l'amplitude de propagation de *positrons* de t à t' (si $t' > t$) et d'*électrons* de t' à t (si $t > t'$); de plus, par convention [SHABAEV 1990b ; HATFIELD 1992], l'adjoint $\hat{\psi}_H^\dagger$ de (III.3) est remplacé par l'adjoint *de Dirac* (II.17) en représentation de Heisenberg. On voit ainsi que le propagateur représente toujours une propagation de particule d'un instant à un autre *qui le suit*, ce qui est physiquement simple. Mais avant de donner la définition générale du propagateur, il nous faut introduire la notion d'*opérateur chronologique* qu'elle utilise.

.....
 Opérateur
 chronolo-
 gique et
 définition
 du
 propagateur

D'après la discussion qui précède, faire propager N électrons de t' à $t > t'$ — plutôt que N positrons de t à $t' > t$ — s'obtient en intervertissant les champs quantiques $\hat{\psi}_H$ et $\hat{\psi}_H^\dagger$ dans l'amplitude (III.3); il est habituel de réaliser cette permutation grâce à l'« *opérateur chronologique* » (de Wick³) T [WICK 1950 ; SCHWEBER 1961], qui oblige les opérateurs à agir dans

¹La notion de « particule » est ici celle de particules *réelles* et non des particules de Dirac qui forment la base de l'espace de Fock (II.5).

²En d'autres termes, l'état à N positrons (III.2) est un *produit tensoriel* de N fonctions d'onde, que nous avons rendu explicite par des indices, par souci de simplicité.

³Il est parfois utile de définir un autre opérateur chronologique, dû à Dyson, qui est identique à celui de Wick à ceci près qu'il permute les opérateurs mais n'ajoute pas de signe à l'expression finale — *cf.* (III.4). On pourra par exemple consulter à ce sujet SCHWEBER [1961].

l'ordre des temps croissants et est défini de la façon suivante : d'après l'expression (III.3) pour les positrons, nous avons deux groupes d'opérateurs¹

$$\hat{O}(t) \equiv \hat{\psi}_H^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, t) \cdots \hat{\psi}_H^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N, t)$$

et

$$\hat{O}'(t') \equiv \hat{\psi}_{\alpha'_N}^H(\mathbf{x}'_N, t') \cdots \hat{\psi}_{\alpha'_1}^H(\mathbf{x}'_1, t')$$

que l'on fait toujours agir dans l'ordre des temps croissants grâce à

$$\mathbb{T} \left\{ \hat{O}(t) \hat{O}'(t') \right\} \equiv \begin{cases} \hat{O}(t) \hat{O}'(t') & \text{si } t > t' \\ (-1)^N \hat{O}'(t') \hat{O}(t) & \text{si } t' > t. \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

(Le signe $(-1)^N$ s'avérera fondamental dans la suite, puisqu'il est intimement lié au fait que nous manipulons des fermions.) Nous pouvons grâce à cette notation donner la définition habituelle [SHABAEV 1990b] du propagateur à N particules et *deux*² temps S_F^N , avec le champ quantique $\hat{\psi}_H$ en représentation de Heisenberg (III.1) :

$$\begin{aligned} S_F^{N, \alpha_1 \dots \alpha_N}_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N, t') & \quad (\text{III.5}) \\ \equiv \langle \Omega | \mathbb{T} \left\{ \left[\hat{\psi}_H^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, t) \cdots \hat{\psi}_H^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N, t) \right] \left[\hat{\psi}_{\alpha'_N}^H(\mathbf{x}'_N, t') \cdots \hat{\psi}_{\alpha'_1}^H(\mathbf{x}'_1, t') \right] \right\} | \Omega \rangle, \end{aligned}$$

où nous avons explicitement indiqué les indices choisis pour chaque champ quantique afin de détailler la nature mathématique de l'amplitude de probabilité. Ce propagateur représente précisément l'amplitude quantique que nous avons suggérée dans la figure II.2.

Comme dans la suite nous aurons peu recours à l'usage *séparé* des coordonnées spatiales \mathbf{x}_i et des indices $\alpha_i = 1, \dots, 4$ décrivant l'une des quatre composantes des fonctions d'onde de Dirac, nous les regrouperons dorénavant sous une

$$\text{unique coordonnée } \xi_i \equiv (\mathbf{x}_i, \alpha_i), \quad (\text{III.6})$$

¹L'abaissement des indices dans les $\hat{\psi}_{\alpha'_i}^H$ ne correspond *pas* à l'application du tenseur métrique g sur les bispineurs de Dirac du champ $\hat{\psi}_H$ (III.1) — qui ne sont pas des 4-vecteurs. Le champ $\hat{\psi}_{\alpha'_i}^H$ est simplement l'*adjoint* du champ $\hat{\psi}_H^{\alpha'_i}$ (III.1); cette notation sert simplement à rendre symétrique l'écriture du propagateur S_F^N (III.5).

²Contrairement au propagateur que nous présentons ici, on utilise habituellement en QED des particules libres des propagateurs qui sont l'analogie de (III.5), mais définis avec *un temps par particule*. Cela provient du fait que dans les calculs de section efficace de collision, il est nécessaire de pouvoir faire apparaître les quantités de mouvement de chaque particule individuellement (voir par exemple la formule de réduction de Lehmann–Symanzik–Zimmermann dans PESKIN and SCHROEDER [1995]).

avec laquelle nous noterons à la fois la position *et* la composante utilisée dans chaque champ :

$$\hat{\psi}_H(\xi_i, t) \equiv \hat{\psi}_H^{\alpha_i}(\mathbf{x}_i, t), \text{ etc.}$$

si bien que nous pourrions noter plus simplement le *propagateur à N électrons entre deux temps* :

$$\begin{aligned} S_F^N(\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t';) & \quad (III.7) \\ \equiv \langle \Omega | T \left\{ [\hat{\psi}_H(\xi_1, t) \cdots \hat{\psi}_H(\xi_N, t)] [\hat{\bar{\psi}}_H(\xi'_N, t') \cdots \hat{\bar{\psi}}_H(\xi'_1, t')] \right\} | \Omega \rangle. \end{aligned}$$

L'ordre particulier choisi pour l'application des champs quantiques suit la *convention* de la référence SHABAEV [1994].

Notons cependant que les indices α_i de produit tensoriel sur les fonctions d'onde de (III.5) ne sont pas explicites dans la littérature [SHABAEV and FOKEEVA 1994 ; PESKIN and SCHROEDER 1995]. Nous tenterons cependant de toujours indiquer les indices tensoriels soit directement, soit au travers des coordonnées ξ_i (III.6), pour plus de clarté.

.....
Invariance
de Lorentz

Le propagateur à *deux* temps (III.7) n'est *pas* invariant de Lorentz, puisqu'une transformation de Lorentz appliquée aux coordonnées spatio-temporelles des champs quantiques de (III.7) produirait des 4-coordonnées qui sont en général situées à $4N$ temps *différents*. Cette absence d'invariance relativiste ne fait que refléter la situation privilégiée du référentiel dans lequel on étudie les niveaux atomiques.

III/2.2 Fonction de Green en énergie

Pour faire apparaître des énergies au travers du propagateur (III.5), il est naturel d'en effectuer une transformée de Fourier par rapport au temps.

Bien que le propagateur (III.5) contienne *deux* temps, il ne dépend que de l'*intervalle* qui sépare ces deux instants — comme on s'y attend physiquement par invariance dans le temps des propriétés physique prédites par QED; nous définirons donc la fonction de Green en énergie comme la transformée de Fourier du propagateur *par rapport à la durée de propagation*.

.....
Temps de
propagation

Il est instructif de montrer explicitement que le propagateur (III.5) ne dépend que du *temps de propagation* : si l'on insère explicitement l'évolution temporelle (III.1) des champs quantiques dans le propagateur (III.5), on trouve par exemple dans le cas $t > t'$ que

$$\begin{aligned} S_F^N{}_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}^{\alpha_1 \dots \alpha_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N, t') \\ = \langle \Omega | [e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N) e^{-i\hat{H}t}] [e^{i\hat{H}t'} \hat{\bar{\psi}}_{\alpha'_N}(\mathbf{x}'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}_{\alpha'_1}(\mathbf{x}'_1) e^{-i\hat{H}t'}] | \Omega \rangle, \end{aligned}$$

où le fait que l'énergie du vide $|\Omega\rangle$ de \hat{H} soit *nulle* (par définition) donne $\exp(-i\hat{H}t)|\Omega\rangle = |\Omega\rangle$, si bien que pour $t > t'$, le propagateur ne dépend que du *temps de propagation* $t - t'$:

$$\begin{aligned} S_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}^{N \alpha_1 \dots \alpha_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N, t') \\ = \langle \Omega | \hat{\psi}^{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^{\alpha_N}(\mathbf{x}_N) e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{\psi}_{\alpha'_N}(\mathbf{x}'_N) \dots \hat{\psi}_{\alpha'_1}(\mathbf{x}'_1) | \Omega \rangle, \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

où l'on voit la création de N électrons aux positions $\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N$ (contenues dans les coordonnées ξ de (III.6)) puis leur évolution durant un temps $t - t' > 0$, puis leur recouvrement avec N électrons aux positions $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$. Pour $t < t'$, le propagateur (III.5) ne dépend aussi que de $t - t'$, grâce au même mécanisme que ci-dessus.

.....
Définition
pour les
énergies
réelles

Nous pouvons donc transformer naturellement le temps de propagation en énergie par transformée de Fourier, ce qui nous amène à la définition suivante de la fonction de Green de N particules en fonction d'une énergie *réelle*, à partir du propagateur (III.7) :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{R}) \\ \equiv \frac{1}{i} \int d\Delta t e^{iE\Delta t} S_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}^N(\xi_1, \dots, \xi_N, \Delta t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t' = 0). \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

Le facteur $1/i$ est conventionnel et suit la référence SHABAEV and FOKEEVA [1994]. Par contre, ma fonction de Green (III.9) vaut $N!$ fois plus que celle définie par Shabaev, afin d'éviter d'introduire des complications que je trouve inutiles. J'ai d'autre part choisi d'indiquer explicitement que la transformée de Fourier est définie pour des énergies *réelles* pour insister sur le fait qu'une partie imaginaire non nulle de E causerait *a priori* un problème de convergence de l'intégrale pour l'un des temps infinis, comme nous allons le voir dans un calcul qui explicite la définition (III.9) de la fonction de Green en énergie.

.....
Définition
pour les
énergies
complexes

Afin d'extraire les énergies atomiques des singularités de cette fonction d'une énergie *réelle*, il est extrêmement pratique de la transformer en une fonction d'une énergie E *complexe* (les singularités devenant alors des *pôles* ou des *coupures*). Nous définissons ainsi la fonction de Green sur \mathbb{C} par *prolongement analytique* de (III.9) :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{C}) \\ \equiv \text{prolongement analytique en } E \\ \text{de } \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{R}). \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

Notons qu'il n'y a *a priori* pas unicité du prolongement analytique (III.10) d'une fonction à partir de l'axe réel vers le plan complexe : en effet, les *coupures* d'une fonction de \mathbb{C} peuvent en général être *déplacées* pour donner

un autre prolongement analytique. La fonction de Green (III.10) n'est donc pas définie de façon non ambiguë sur \mathbb{C} ; cependant, nous verrons qu'il est possible de la définir de façon univoque sur une zone *restreinte* autour de l'axe réel (*cf.* section III/2.4) et de se servir de ce prolongement unique pour obtenir les niveaux atomiques.

Le prolongement analytique (III.10) est important, dans la pratique, bien qu'il ne soit pas mentionné explicitement, à notre connaissance, dans la littérature publiée sur la méthode de la fonction de Green à deux temps (sauf dans SHABAEV [2002] et SHABAEV [2000], suite à nos discussions avec l'auteur) : en effet, les règles de Feynman de la méthode (section III/5) permettent de construire la fonction de Green pour des énergies *réelles* (III.9) et donnent des formules *qui ne coïncident pas avec la fonction de Green (III.10) pour des énergies complexes*. Or c'est la fonction de Green pour des énergies *complexes* (III.10) qui s'avérera nécessaire à la dérivation des expressions pour les *niveaux d'énergie atomiques* (section III/2.4). Je détaillerai plus loin (chapitre IV) la méthode concrète et systématique que je propose pour le passage de (III.9) à (III.10).

Structure analytique de la fonction de Green

Nous détaillons ici la structure analytique de la fonction de Green (III.10), car celle-ci mène directement à l'extraction des niveaux atomiques (section III/2.4).

La fonction de Green étant initialement donnée pour les énergies *réelles* (III.9), nous étudions tout d'abord les singularités de cette fonction. Le prolongement aux énergies complexes (III.10) nous mènera à la structure analytique (pôles et coupures) de la fonction de Green.

Nous allons ainsi montrer que l'amplitude de propagation (III.5) entre deux temps arbitraires contient dans son spectre de Fourier (par rapport à la durée de la propagation) des pics à des valeurs bien particulières qui ne sont autres que les niveaux d'énergie d'un atome à N électrons — ce qui est rendu plausible par le fait que l'évolution d'un système quantique *sous le hamiltonien de QED* est contenue dans les champs quantiques de (III.5) au travers de la représentation de Heisenberg (III.1). Nous avons illustré cette propriété dans la figure III.1.

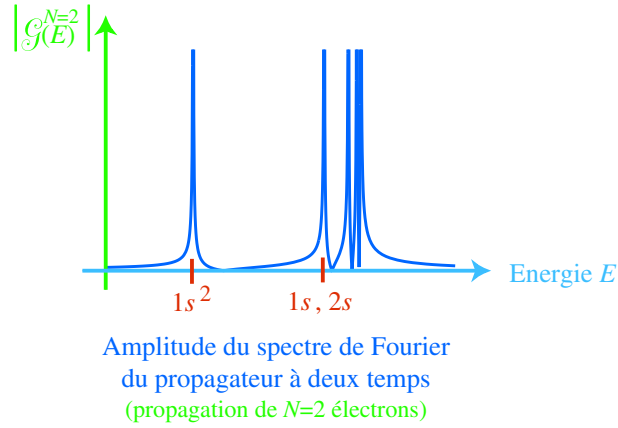


FIG. III.1 – *Transformée de Fourier du propagateur à deux temps.* Nous avons représenté la transformée de Fourier (par rapport au temps de propagation) du propagateur $S_F^{N=2}$ (III.7) à deux temps et $N = 2$ particules. Cette transformée de Fourier donne par définition la fonction de Green (III.9) pour des énergies E réelles. Comme montré dans la section III/2.3, les niveaux d'énergie des atomes et ions à $N = 2$ électrons apparaissent comme des singularités de la fonction de Green (III.9).

III/2.3-a \diamond **Développement en temps du propagateur**

Développement sur les états propres de QED

Afin de pouvoir décrire les propriétés analytiques de la fonction de Green (III.9), il est utile de détailler le lien entre le *propagateur* de N particules S_F^N (III.5) et les *énergies* atomiques; ce lien se fait naturellement au travers de l'évolution des états stationnaires du hamiltonien (II.27) de l'électrodynamique des états liés et nous le précisons ci-dessous. L'évaluation que nous présentons est *théorique*, dans la mesure où il n'existe pas de méthode pour calculer ces états propres exactement. Nous verrons plus loin (section III/4.2) comment il est cependant possible d'utiliser ces propriétés théoriques dans des calculs perturbatifs concrets afin d'aboutir par exemple à des formules donnant les contributions de l'électrodynamique quantique des états liés aux niveaux d'énergie atomiques.

Comme l'évolution temporelle du propagateur S_F^N (III.5) provient du hamiltonien total \hat{H} (II.27) de l'électrodynamique des états liés, il est pratique pour l'exprimer d'introduire une base $|\mathbf{n}\rangle$ de l'espace de Fock constituée des *états propres* de \hat{H} (d'énergie notée $E_{\mathbf{n}}$), que nous regroupons en états de *charge fixée* afin qu'ils puissent décrire les états stationnaires *atomiques* (cf. section II/1.3). Le propagateur de N particules s'exprime alors simplement grâce à la relation de fermeture sur cette base (où nous utilisons le premier calcul (III.8) et la définition (III.4) de l'opérateur chronologique du propagateur (III.5)) :

$$\begin{aligned}
 & S_{\text{F}}^N(\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t') \quad (\text{III.11}) \\
 & = \begin{cases} \text{si } t > t' : \\ \quad \sum_{|\mathbf{n}\rangle} \langle \Omega | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n} \rangle e^{-iE_{\mathbf{n}}(t-t')} \langle \mathbf{n} | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \Omega \rangle \\ \text{si } t' > t : \\ \quad (-1)^N \sum_{|\mathbf{n}\rangle} \langle \Omega | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \mathbf{n} \rangle e^{-iE_{\mathbf{n}}(t'-t)} \langle \mathbf{n} | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \Omega \rangle \end{cases}
 \end{aligned}$$

où nous voyons très explicitement l'évolution temporelle de chaque terme — nous rappelons que $\hat{\psi}$ est le champ quantique de Dirac dans la représentation de Schrödinger (II.25).

Sélection
des états
atomiques

Afin de voir le lien entre ce *propagateur* de N électrons ou N positrons et les *atomes* à N électrons, il est utile de supprimer de la somme sur les états propres $|\mathbf{n}\rangle$ ceux qui ne contribuent en fait pas au propagateur. Cette sélection, importante d'un point de vue physique, et fondamentale pour l'obtention des niveaux d'énergie d'un atome de charge donnée, n'est pas explicite dans les présentations de la méthode de la fonction de Green à deux temps [SHABAEV 1994, 1988b, 1990a]; elle est pourtant nécessaire pour justifier le fait que seules les énergies des systèmes à N électrons (ou N positrons) apparaissent dans la fonction de Green à N particules (III.10). Ainsi, seuls les états $|\mathbf{n}\rangle$ de charge $\pm Nq_e$ — correspondant donc en particulier aux atomes à N électrons — donneront des termes non nuls à (III.11); ceci est dû à la *conservation de la charge* : comme mentionné p. 56 le champ quantique $\hat{\psi}$ enlève une charge électronique q_e à tout état (II.5) sur lequel il s'applique, si bien que les seuls termes de (III.11) qui subsistent dans (III.11) (par exemple pour $t' > t$) sont ceux de charge $-Nq_e$ (Nq_e si $t > t'$). Nous voyons ainsi que le propagateur à N particules S_{F}^N ne peut donner d'information *que* sur les énergies des états de charge $\pm Nq_e$ (correspondant soit aux atomes à N électrons, soit aux états contenant N positrons) :

$$\begin{aligned}
 & S_{\text{F}}^N(\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t') \quad (\text{III.12}) \\
 & = \begin{cases} \text{si } t > t' : \\ \quad \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } Nq_e}} \langle \Omega | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n} \rangle e^{-iE_{\mathbf{n}}(t-t')} \langle \mathbf{n} | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \Omega \rangle \\ \text{si } t' > t : \\ \quad (-1)^N \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } -Nq_e}} \langle \Omega | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \mathbf{n} \rangle e^{-iE_{\mathbf{n}}(t'-t)} \langle \mathbf{n} | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \Omega \rangle \end{cases}
 \end{aligned}$$

Grâce à sa dépendance en temps explicite, la forme (III.12) du propagateur que nous venons de présenter se prête aisément à la transformation de Fourier (III.9), vers laquelle nous nous tournons immédiatement.

III/2.3-b \diamond **Structure formelle**

Calcul de la transformée de Fourier

Faire converger l'intégrale sur le temps de la définition (III.9) pour chacun des termes du propagateur (III.12) est rendu facile par le fait que l'énergie E de la définition et les énergies propres E_n sont *réelles* (par hermiticité du hamiltonien (II.27) de QED); ainsi, le calcul de la transformée de Fourier de (III.9) se ramène grâce à (III.12) au calcul d'intégrales de la forme

$$\int_0^\infty dt e^{i\Delta Et}$$

(avec ΔE réel), quantités qui peuvent se définir simplement en forçant l'exponentielle à être décroissante : en modifiant ΔE par ajout ou soustraction d'une quantité *imaginaire infinitésimale* que nous noterons $i0$, on obtient

$$\int_0^\infty dt e^{i\Delta Et} \rightarrow \int_0^\infty dt e^{i(\Delta E+i0)t} = \frac{i}{\Delta E + i0}. \quad (\text{III.13})$$

Notation $i0$

Nous utiliserons abondamment la notation $i0$ par la suite [WICHMANN and KROLL 1956], car elle permet de ne pas s'encombrer de variables supplémentaires (qui tendent vers zéro). La notation $i0$ représente par définition une limite infinitésimale :

$$\dots i0 \dots \Leftrightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \dots i\eta \dots \quad (\text{III.14})$$

Les points de suspension représentent dans cette définition n'importe quelle expression mathématique.

Nous aurons aussi besoin de manipuler des expressions contenant *plus d'une* quantité infinitésimale. Il est naturel, dans un souci de simplicité, d'inclure dans ce cas *plusieurs* symboles $i0$ dans les formules concernées. Nous définissons ainsi chaque $i0$ comme représentant une limite (III.14) qui utilise une variable *indépendante* de celles définissant tous les autres $i0$; ainsi, par exemple :

$$\dots i0 \dots i0 \dots \Leftrightarrow \lim_{\eta_1 \rightarrow 0^+} \lim_{\eta_2 \rightarrow 0^+} \dots i\eta_1 \dots i\eta_2 \dots \quad (\text{III.15})$$

Dans cette définition, tout comme dans (III.14), les points de suspension représentent une formule mathématique quelconque.

Fonction de Green non perturbative

Avec la notation que nous venons d'introduire, le calcul de la transformée de Fourier (III.9) donne grâce à (III.13) l'expression *non perturbative* sui-

vante pour la fonction de Green pour les énergies E réelles :

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{R}) \\
 &= \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } Nq_e}} \frac{\langle \Omega | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \Omega \rangle}{E - (E_{\mathbf{n}} - i0)} \\
 & - (-1)^N \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } -Nq_e}} \frac{\langle \Omega | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \Omega \rangle}{E - (-E_{\mathbf{n}} + i0)},
 \end{aligned} \tag{III.16}$$

où le champ quantique constant $\hat{\psi}$ est donné en représentation *de Schrödinger* (II.25). Nous voyons clairement dans cette formule la propriété annoncée plus haut : les énergies atomiques (*i. e.*, d'après la p. 55, les énergies des états propres de charge Nq_e du hamiltonien de l'électrodynamique quantique des états liés (II.27)) apparaissent comme les *singularités* de la fonction de Green en énergie. Il semble [SHABAEV 1993] qu'il faille attribuer à LOGUNOV and TAVKHELIDZE [1963] et FAUSTOV [1970] l'idée d'utiliser seulement *deux*¹ *temps* dans le propagateur (III.7) afin de retrouver certaines des énergies du hamiltonien gouvernant l'évolution des champs contenus dans ce propagateur.

.....

Fonction de Green pour une énergie complexe

La fonction de Green pour une énergie complexe s'obtient d'après sa définition (III.10) par un prolongement analytique. Celui-ci n'était pas évident dans la définition (III.9) pour des raisons de convergence. Mais la *formule* non perturbative (III.16), au contraire, se prête immédiatement à ce prolongement, en tant que somme de fonctions méromorphes.² Nous aboutissons donc à une forme simple de la fonction de Green pour une énergie *complexe*, qui est à la base de la méthode de calcul des énergies atomiques

¹Si l'on associe un temps à *chaque* position, dans le propagateur (III.5), faire apparaître des énergies demande de faire subir à chacun d'entre eux une transformation de Fourier analogue à celle de la fonction de Green (III.9) : on aboutit ainsi à une fonction de *plusieurs* variables complexes qui est l'analogue de (III.16) et dont la structure compliquée contient plus d'information que nécessaire pour retrouver les niveaux atomiques.

²Nous passons sur la question technique de la convergence de la somme pour chaque énergie complexe E . Quelques indications à ce sujet se trouvent dans SHABAEV [2000] ou dans SHABAEV [2002].

par la méthode de la fonction de Green à deux temps¹ :

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{C}) \\
 &= \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } Nq_e}} \frac{\langle \Omega | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \Omega \rangle}{E - (E_{\mathbf{n}} - i0)} \\
 & - (-1)^N \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } -Nq_e}} \frac{\langle \Omega | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \Omega \rangle}{E - (-E_{\mathbf{n}} + i0)},
 \end{aligned} \tag{III.17}$$

où nous avons simplement étendu le domaine d'application de l'expression obtenue pour les énergies réelles (III.16), si bien que les singularités de (III.16) deviennent des *pôles* (ou des coupures, créées par les états du continuum) dont les positions donnent les niveaux d'énergie atomiques.² Cette décomposition spectrale de la fonction de Green en énergie est similaire à la représentation de Källén-Lehmann [KÄLLÉN 1952 ; LEHMANN 1954 ; PESKIN and SCHROEDER 1995].

On remarque sur la décomposition spectrale (III.17) qu'il est possible de faire l'analogie avec une fonction de Green définie comme une *résolvante* $1/(E-H)$ [KATO 1949] à partir d'un hamiltonien H qui agit sur les fonctions d'onde (fonctions de \mathbb{R}^3). En effet, si nous notons temporairement ϕ_ℓ une base d'états propres tels que $H\phi_\ell = \mathcal{E}_\ell\phi_\ell$, alors la résolvante vaut en espace des coordonnées

$$\langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H} | \mathbf{x}' \rangle = \sum_{\ell} \frac{\phi_\ell(\mathbf{x})\phi_\ell^*(\mathbf{x}')}{E - \mathcal{E}_\ell} \tag{III.18}$$

(Le cas de fonctions d'onde à plusieurs particules est similaire.) La fonction de Green (III.17) n'est pas définie par une résolvante — cf. (III.9) —, mais il est par contre possible d'interpréter les numérateurs de notre fonction de Green (III.17) comme des *fonctions d'onde* (à N particules) associées aux états de Fock $|\mathbf{n}\rangle$. Peut-être cette remarque peut-elle être appliquée à la construction d'un hamiltonien *défini sur les fonctions d'onde à N particules* à partir de la fonction de Green (III.9); ce hamiltonien serait l'équivalent du hamiltonien second quantifié \hat{H} (II.27) de l'électrodynamique des états liés, mais restreint aux états atomiques à N électrons, et agissant sur des fonctions d'onde plutôt que sur les états de Fock (II.5).

Afin de pouvoir exploiter le résultat *non perturbatif* (III.17) et obtenir la position des énergies $E_{\mathbf{n}}$ des atomes et ions à N électron étudiés, il est

¹Nous rappelons que $\hat{\psi}$ désigne le champ quantique de Dirac en représentation de Schrödinger, défini dans l'Eq. (II.25), et que $\hat{\bar{\psi}}$ est son adjoint de Dirac, obtenu comme dans l'Eq. (II.17).

²Nous verrons plus loin (p. 78) que les numérateurs de (III.19) ne sont pas nuls, si bien que les pôles qui y apparaissent formellement participent effectivement tous aux singularités de la fonction de Green.

d'abord nécessaire que nous présentions en détail la nature des singularités analytiques de cette fonction de Green.

III/2.3-c \diamond Structure analytique

Nous présentons et discutons ici des résultats sur la structure analytique de (III.17) que l'on retrouve dans SHABAEV [2000] ou dans SHABAEV [2002]¹, en y ajoutant quelques commentaires physiques. La relative simplicité de cette structure analytique servira de fondement à l'extraction des énergies atomiques que nous présenterons en section III/2.4.

Vers les
énergies
atomiques

Les propriétés analytiques de fonctions similaires à la fonction de Green de l'électrodynamique des états liés (Eqs. (III.9) et (III.10)) ont été étudiées dans divers domaines de la physique [BONCH-BRUEVICH and TYABLIKOV 1962 ; THOULESS 1961 ; MIGDAL 1983] et en particulier en théorie des champs ([STERMAN 1993, Chap. 13] ; LOGUNOV and TAVKHELIDZE [1963] ; FAUSTOV [1970]) — l'analyse complexe permettant d'obtenir des relations utiles, comme par exemple des relations de dispersion [STERMAN 1993, Chap. 13]. Nous allons donner quelques détails sur le cas particulier (III.10) qui nous intéresse ici, car les ouvrages de référence sur la théorie des champs fournissent le plus souvent une discussion des propriétés analytiques d'un *cas particulier* de fonction de Green : celle à *une particule* ($N = 1$ dans les définitions (III.7) et (III.9)) et *sans potentiel* extérieur V (cf. Eq. (II.1)) ; nous avons cependant relevé quelques références sur ce cas particulier pour le lecteur intéressé : les articles originaux sont KÄLLÉN [1952] ; LEHMANN [1954], et le thème est repris par exemple dans SCHWEBER [1961, § 17b], WEINBERG [1995, § 10.7], PESKIN and SCHROEDER [1995, Chap. 7], BOGOLIUBOV and SHIRKOV [1980, Chap. 10] et AKHIEZER and BERESTETSKII [1965, § 43.2].

Cas sans
interaction

Il est instructif de commencer par regarder les singularités de \mathcal{G}^N dans le cas où l'interaction entre particules chargées est rendue *nulle* (ce qui revient à supprimer l'interaction \hat{H}_I^I du hamiltonien total (II.11) pour n'en garder que le hamiltonien des charges et photons libres \hat{H}_0 (II.12)). Dans cette situation, les états propres $|\mathbf{n}\rangle$ du hamiltonien de la théorie sont simplement les états de la base *canonique* (II.5) (avec pour énergie la somme des énergies (positives) des particules qu'ils contiennent, d'après (II.12)) ; d'autre part, le vide est exactement le vide sans interaction $|0\rangle$ (d'énergie nulle d'après \hat{H}_0 , puisque ne contenant aucun quantum).

Dans cette situation particulière où l'interaction entre charges et photons est supprimée, nous pouvons voir en détails quels sont les états propres $|\mathbf{n}\rangle$ qui sont sélectionnés dans l'expression (III.17). D'une part, ceux-ci ne

¹Nous n'avons pas connaissance de sources écrites par d'autres auteurs et donnant la structure analytique détaillée de la fonction de Green (III.9) qui nous intéresse ici.

contiennent *pas de photons*, puisque le champ quantique $\hat{\psi}$ (II.25) ne change que le nombre d'électrons et de positrons des états (II.5). D'autre part, il est nécessaire que les états propres $|\mathbf{n}\rangle$ contiennent *exactement* N électrons ou N positrons : c'est la seule façon d'obtenir à partir du vide $|0\rangle$ l'un des états de charge $\pm Nq_e$ dans l'Eq. (III.17), grâce à l'application de N opérateurs $\hat{\psi}$ (ou N opérateurs $\hat{\psi}$) — qui ajoutent (ou retranchent) *une* charge électronique q_e aux états auxquels ils s'appliquent.

En bref, *lorsque l'interaction \hat{H}_S^I (II.19) est supprimée du hamiltonien (II.27)*, la fonction de Green de N particules (III.10) est donnée d'après (III.17) par la somme suivante

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{C}) \\ &= \sum_{\substack{N \text{ électrons} \\ |\mathbf{n}_0\rangle = |n_N, \dots, n_1\rangle}} \frac{\langle 0 | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n}_0 \rangle \langle \mathbf{n}_0 | \hat{\psi}(\xi'_N) \cdots \hat{\psi}(\xi'_1) | 0 \rangle}{E - ((\varepsilon_{n_1} + \cdots + \varepsilon_{n_N}) - i0)} \\ & - (-1)^N \sum_{\substack{N \text{ positrons} \\ |\mathbf{n}_0\rangle = |n_1, \dots, n_N\rangle}} \frac{\langle 0 | \hat{\psi}(\xi'_N) \cdots \hat{\psi}(\xi'_1) | \mathbf{n}_0 \rangle \langle \mathbf{n}_0 | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | 0 \rangle}{E - ((\varepsilon_{n_1} + \cdots + \varepsilon_{n_N}) + i0)}, \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

qui se fait seulement sur les états à *exactement* N électrons ou N positrons et sans photons ($\hat{\psi}$ est ici le champ quantique de Dirac dans la représentation de Schrödinger¹ (II.25) — en particulier, il ne fait pas intervenir l'interaction (II.26)). Nous avons indiqué dans (III.19) que les énergies E_n de (III.17) sont la somme des énergies de N électrons ou bien des énergies de N positrons de l'équation de Dirac (II.1), conformément à la définition du hamiltonien non perturbé (II.12) (en d'autres termes, la fonction de Green (III.17) contient les énergies d'états à N particules de charges *identiques*).

Afin de nous assurer de la présence effective de pôles aux énergies de N électrons ou N positrons dans la fonction de Green (III.19), il nous reste cependant à vérifier que les *résidus* correspondants ne sont *pas nuls*. Grâce à la définition explicite du champ quantique $\hat{\psi}_1$ (II.9) et des opérateurs de création et d'annihilation de quanta (Eqs. (II.6) et (II.7)), on voit apparaître dans les résidus des *fonctions d'onde à N particules* (non normalisées) : par exemple, si $|\mathbf{n}_0\rangle$ est un état à N électrons $|n_N, \dots, n_1\rangle$

$$\langle \mathbf{n}_0 | \hat{\psi}(\xi'_N) \cdots \hat{\psi}(\xi'_1) | 0 \rangle = \sum_{\sigma'} (-1)^{\sigma'} \bar{\phi}_{n_{\sigma'(N)}}(\xi'_N) \cdots \bar{\phi}_{n_{\sigma'(1)}}(\xi'_1), \quad (\text{III.20})$$

où l'on retrouve les états propres ϕ de l'équation de Dirac (II.1), où la permutation σ' mélange² les électrons $1, \dots, N$ et où sa signature est notée $(-1)^{\sigma'}$ (on obtient pour les autres produits de (III.19) un résultat similaire).

¹La fonction de Green (III.10) dans le cas non perturbé (III.19) se confond pour une particule ($N = 1$) avec le propagateur de Dirac : voir la formule (C.7a) dans l'appendice C.

²On retrouve ici une fonction d'onde représentée par un déterminant de Slater.

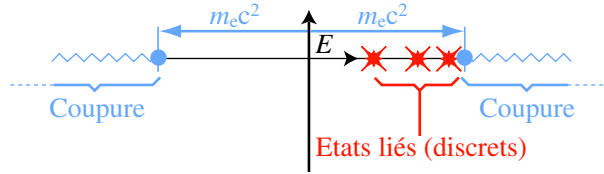


FIG. III.2 – Structure analytique de la fonction de Green, où l’interaction (II.18b) entre charges et photons a été supprimée. La figure illustre les singularités de la fonction de Green à une particule pour une interaction \hat{H}_S^I (II.26) prise nulle. D’une manière générale, les énergies d’un atome à N électrons apparaissent comme les pôles de la fonction de Green à N particules $\mathcal{G}^N(E)$ (III.17). Les énergies des états à N positrons ne se mélangent pas à celles des états à N électrons (coupure sur la partie négative de l’axe réel). Enfin, les états (non liés) des continua créent des singularités faibles (coupures).

Ces fonctions d’onde n’étant pas nulles, la fonction de Green (III.19) contient effectivement les pôles indiqués.

Nous avons représenté dans la figure III.2 la position des singularité de la fonction de Green non perturbée (III.19), dans le cas simple d’un ion hydrogénoïde (propagation d’une particule, soit $N = 1$). On observe sur la figure que les états contenant des positrons donnent une singularité pour des énergies négatives, bien que les énergies des états propres $|\mathbf{n}_0\rangle$ données par le hamiltonien (II.12) soient positives (voir l’expression explicite (III.19) de la fonction de Green). D’un point de vue pratique, la propriété la plus importante des singularités montrées dans la figure III.2 réside dans le fait que les énergies atomiques donnent des pôles isolés, dont on pourra extraire la position — propriété que l’on étendra à la fonction de Green pour le hamiltonien total (II.27).

Cas avec
interaction

On pourrait s’attendre à ce que l’influence de l’interaction (II.18b) entre électrons, qui change les niveaux d’énergie atomiques, modifie simplement la position des pôles de la figure III.2. En particulier, l’hermiticité du hamiltonien (II.27) donnerait des pôles réels dans (III.17) aux énergies atomiques exactes. Cette situation se retrouve d’ailleurs dans le cas de la représentation spectrale de Källén–Lehman [PESKIN and SCHROEDER 1995, Chap. 7].

En fait [SHABAEV 1994, 2000, 2002], l’interaction entre charges modifie plus profondément que cela la structure analytique présentée dans la figure III.2 : d’une part l’instabilité des niveaux excités déplace les pôles de ces états sous l’axe réel (d’une distance liée à leur largeur [SHABAEV 2000, 2002]); d’autre part, des photons d’énergie quelconque peuvent d’ajouter aux états atomiques, si bien que chaque énergie atomique devient l’origine

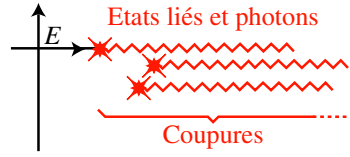


FIG. III.3 – *Structure analytique de la fonction de Green (III.10)*. La présence possible de photons de fréquences quelconques donne naissance à des états d'énergie variant continûment à partir des énergies atomiques et donc à des *coupures* dont le point de branchement est situé à une énergie atomique. L'instabilité des états excités apparaît sous forme d'une partie imaginaire négative dans la position des points de branchement.

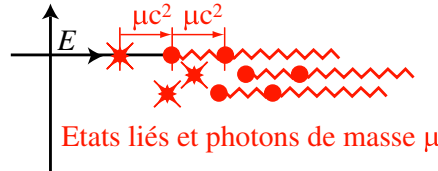


FIG. III.4 – *Effet d'une masse photonique sur la structure analytique de la fonction de Green (III.10) d'un ion hydrogénoïde*. La masse μ des photons permet d'*isoler* les énergies des niveaux atomiques (comparer à la figure III.3), ce qui permet de déterminer mathématiquement leur position. Ce graphe montre les singularités dues à des états à zéro, un et deux photons de masse $\mu \neq 0$ [SHABAEV 2002, 2000].

d'une coupure située dans le plan du paramètre énergétique E de la fonction de Green (III.10). Cette situation — qui sert de base à l'extraction des énergies atomiques — est résumée dans la figure III.3.

III/2.4

De la fonction de Green aux énergies atomiques

Nous montrons dans cette section comment les prédictions de QED pour les niveaux d'énergie atomiques peuvent s'obtenir grâce aux propriétés analytiques de la fonction de Green pour les énergies complexes (III.10), que nous avons décrites p. 77. Nous ne présentons ici que le *principe* de l'obtention des niveaux atomiques, reléguant les techniques rendues nécessaires par l'emploi d'un calcul perturbatif de la fonction de Green (III.9) à la section III/4.2 et au chapitre IV.

.....

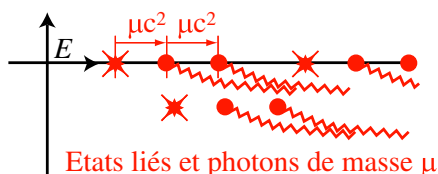


FIG. III.5 – Influence de la masse photonique sur la structure analytique de la fonction de Green (III.10). La masse μ des photons et un déplacement des coupures de la figure III.3 par prolongement analytique permettent d'isoler les énergies des niveaux atomiques (comparer à la figure III.3), ce qui permet de déterminer mathématiquement leur position.

Masse des photons

Afin d'isoler les énergies atomiques, dans la structure analytique de la fonction de Green présentée dans la figure III.3, on peut donner artificiellement une masse μ aux photons [SHABAEV 1994] : cela a pour effet d'augmenter l'énergie du système d'au moins μc^2 lorsqu'on ajoute un photon à un état atomique ; la structure de la fonction de Green présentée dans la figure III.3 est alors modifiée comme dessiné dans la figure III.4, où l'on voit que la masse des photons permet d'obtenir des énergies atomiques *isolées* (sauf si une coupure due aux photons passe exactement dessus), ce qui facilite, comme nous allons le voir, l'obtention mathématique de leur position.

À terme, cependant, cette masse photonique μ sera prise *infinitement petite*, si bien que l'on peut raisonnablement supposer qu'elle n'aura aucune influence sur les prédictions des niveaux d'énergie par QED.

Déplacement des coupures

À la vue des positions des singularités de la fonction de Green dessinées dans la figure III.4, on pourrait craindre que l'une des coupures associée aux états atomiques ne tombe *exactement* sur une énergie atomique, si bien que celle-ci ne contribuerait plus par un pôle *isolé* à la fonction de Green (III.17) — propriété dont nous avons *besoin* (III.24) pour obtenir les niveaux d'énergie atomiques.

Un autre problème, plus fondamental, se pose : celui de la définition même de la fonction de Green (III.10) ; en effet, une fonction possédant des coupures dans le plan complexe peut se prêter à une infinité de prolongements analytiques. Ainsi, la définition (III.10) de la fonction de Green est *ambiguë*. Il est malgré tout possible de définir de façon univoque la fonction de Green (III.10) *au voisinage des énergies atomiques*.

En effet, nous pouvons utiliser la liberté laissée par les *coupures* d'une fonction méromorphe, que l'on peut *déplacer* (en recouvrant partiellement un feuillet de Riemann par un autre), comme dessiné dans la figure III.5 [SHABAEV 1994, 2000, 2002] ; ce déplacement de coupures donne *différents* prolongements analytiques à \mathbb{C} de la fonction de Green (*cf.* p. 70). Ainsi,

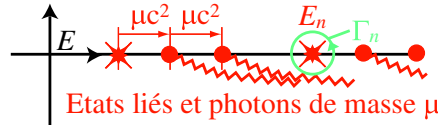


FIG. III.6 – *Intégration autour d’une énergie atomique.* Chaque énergie atomique E_n donnant un pôle *isolé*, il est possible d’en obtenir la position exacte par une intégration le long de n’importe quel contour Γ_n qui l’entoure (cf. Eq. (III.24)).

la fonction de Green est définie de manière *univoque* à l’intérieur de tout contour Γ_n suffisamment proche d’une énergie atomique E_n , par prolongement analytique autour de cette énergie — et non à tout le plan complexe. De plus, toutes les énergies atomiques E_n peuvent ainsi donner des pôles *isolés* et être obtenues mathématiquement grâce à (III.24). Nous verrons dans les calculs concrets du chapitre IV comment ce mécanisme peut être mis en œuvre en pratique. Ainsi, il est toujours possible d’*isoler* les énergies atomiques et d’obtenir grâce à (III.24) leur position exacte.

Principe de l’extraction des énergies atomiques

Comme les énergies atomiques apparaissent finalement sous forme de *pôles simples isolés* de la fonction de Green en énergie (grâce à un prolongement analytique en leur voisinage et à l’ajout d’une masse aux photons ; voir la figure III.5), il est possible d’extraire la position des pôles (*i. e.* la valeur des énergies atomiques) de la façon suivante. Prenons une fonction g qui possède un pôle (simple) en E_n :

$$g(E) \underset{E \rightarrow E_n}{\simeq} \frac{R}{E - E_n}, \quad (\text{III.21})$$

où le résidu en E_n est noté R . Ce résidu ne nous intéresse pas ici (puisque l’on cherche E_n), si bien que nous l’extrayons grâce à un contour Γ_n qui encercle seulement la singularité E_n de g :

$$R = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE g(E) \quad (\text{III.22})$$

(voir la figure III.6). Il est alors possible d’obtenir mathématiquement de la fonction $g(E)$ la position exacte de ce pôle E_n en modifiant d’abord le résidu pour y faire apparaître E_n :

$$R E_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE E \times g(E), \quad (\text{III.23})$$

puis en combinant les intégrales de contour de $g(E)$ et de $E \times g(E)$ ci-dessus :

$$E_n = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE E \times g(E)}{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE g(E)} ; \quad (\text{III.24})$$

cette formule permet de passer de la fonction $g(E)$ (III.21) à la position exacte de son pôle, par intégration sur un contour Γ_n quelconque qui entoure ce pôle (et seulement lui).

Calcul
perturbatif
des énergies

L'application de la formule (III.24) d'extraction de la position d'un pôle de g est le principe suivant lequel les énergies atomiques sont obtenues à partir de la fonction de Green (III.17). Cependant, cette formule reste théorique dans la mesure où il est nécessaire d'entourer avec le contour Γ_n l'énergie propre *exacte* E_n que l'on cherche... et qui est ainsi à une position *incon nue* ! Malgré tout, il est possible d'utiliser (III.24) de manière *perturbative* (au travers d'un développement de la fonction de Green), comme nous allons le voir dans le chapitre suivant.

SECTION 3 (Chapitre III)

Calcul perturbatif du propagateur à N particules

Le développement perturbatif du *propagateur* (III.5) qui est utilisé dans la définition de la fonction de Green (III.9) sert de base au calcul perturbatif de celle-ci. Nous détaillons ici ce développement.

III/3.1

Développement du propagateur

Les calculs concrets de la fonction de Green (III.9) — et donc des niveaux atomiques, grâce à une formule (III.39) semblable à (III.24) — se réalisent grâce à une formule fondamentale¹ de QED [ITZYKSON and ZUBER 1980,

¹À notre connaissance, ce point n'a été mentionné dans les articles sur la fonction de Green que près de dix ans [SHABAEV 2000, 2002] après les premières publications [SHABAEV 1988b, 1990a].

p. 263] qui donne le développement perturbatif du *propagateur* (III.7) :

$$S_F^N(\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t') \equiv \langle \Omega | T \left\{ [\hat{\psi}_H(\xi_1, t) \cdots \hat{\psi}_H(\xi_N, t)] [\hat{\psi}^H(\xi'_N, t') \cdots \hat{\psi}^H(\xi'_1, t')] \right\} | \Omega \rangle, \quad (\text{III.25a})$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \times \quad (\text{III.25b})$$

$$\langle 0 | T \left\{ [\hat{\psi}_I(\xi_1, t) \cdots \hat{\psi}_I(\xi_N, t)] [\hat{\psi}_I(\xi'_N, t') \cdots \hat{\psi}_I(\xi'_1, t')] \left[\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \hat{H}_I^I(\tau) \right]^k \right\} | 0 \rangle_c.$$

(Nous indiquons p. 86 la signification de l'indice « c » final.) Nous allons voir que les diagrammes de Feynman permettent d'interpréter ce résultat, qui dit essentiellement que pour obtenir perturbativement l'amplitude de propagation de particules qui échangent constamment des photons, il suffit de sommer sur les scénarios où le nombre de photons échangés vaut successivement $k = 0, 1, 2, \dots$. Avant de définir précisément les notations T et $\langle 0 | \cdots | 0 \rangle_c$ utilisées dans la dernière expression de ce résultat, notons que cette formule permet de passer de l'évolution exacte (et inconnue) du champ quantique $\hat{\psi}_H$ (III.1) sous le hamiltonien total (II.27) au champ quantique en représentation d'interaction $\hat{\psi}_I$ (II.9), qui a l'avantage d'être très simple, contrairement à $\hat{\psi}_H$ — cette simplification se faisant au prix d'un développement perturbatif en l'interaction \hat{H}_I^I (II.18a). Notons aussi que le vide $|\Omega\rangle$ du hamiltonien total n'est pas requis par la formule perturbative, qui n'utilise que le vide $|0\rangle$ de particules sans interaction, qui est beaucoup plus simple.

Le développement (III.25b) dit essentiellement que l'amplitude de propagation de N électrons réels¹ (ou N positrons) entre deux temps s'obtient comme la *somme d'amplitudes* de propagation d'électrons *libres* (usage de $\hat{\psi}_I$ (II.9)) subissant $k = 0, \dots, \infty$ fois une interaction élémentaire \hat{H}_I^I (II.18a) avec le champ électromagnétique. Nous allons voir ce qui peut motiver une telle interprétation.

III/3.2

Opérateur chronologique

.....
 Événements
 de création
 et d'annihila-
 tion

D'une part, l'*opérateur chronologique* T (voir p. 67) de (III.25b) impose par définition que les temps associés aux opérateurs dictent l'ordre dans lequel ceux-ci doivent être appliqués au ket $|0\rangle$ du vide : T change l'ordre formel des champs de (III.25b) en imposant d'appliquer sur $|0\rangle$ les opérateurs *dans l'ordre des temps croissants* (y compris les k opérateurs d'interaction

¹« Réels » signifie ici : « habillés par l'interaction avec le champ électromagnétique quantifié » (usage de $\hat{\psi}_H$ (III.1)).

$\hat{H}_I^1(\tau)$ appliqués à k temps τ généralement différents — il faut ainsi effectuer l'ordonnancement temporel *avant* les intégrations, contrairement à ce que la notation suggère).

Nous retrouvons la situation rencontrée lors de la définition du propagateur (III.5) : l'opérateur chronologique assure que l'on applique les opérateurs de création et d'annihilation de quanta $\hat{\psi}_I, \hat{\bar{\psi}}_I$ et \hat{A} (cf. section II/1.2) *comme si ces événements physiques se déroulaient successivement*.

.....
 Multitude de processus Ce sont ces opérateurs élémentaires qui créent des paires électron/positron, sont responsables (au travers des hamiltoniens $\hat{H}_I^1(\tau)$ (II.18a)) du passage d'un état électronique à un autre par annihilation puis création de quanta, *etc.* Pour prendre en compte l'influence de ces événements sur la propagation (III.25a) de N électrons, il est nécessaire de prendre en compte *tous les temps τ possibles* où les interactions élémentaires peuvent avoir lieu, comme l'indiquent les k intégrations sur les temps τ de (III.25b).

De la même façon, il faut considérer que les créations et annihilations de quanta imposées par les interactions $\hat{H}_I^1(\tau)$ de (III.25b) peuvent se produire en *tous les points possibles* de l'espace, d'après l'intégration spatiale de la définition (II.18a) — il est naturel qu'il n'y ait pas de point privilégié pour l'interaction entre champ électromagnétique et matière.

III/3.3 Théorème de Wick

.....
 Produit d'amplitudes élémentaires Malgré la multitude des ordonnancements temporels possibles et la richesse des processus physiques impliqués par les champs élémentaires¹ $\hat{\psi}_I$ et \hat{A} , chaque terme de l'expansion (III.25b) peut se résumer de façon simple en quelques diagrammes (de Feynman), grâce au *théorème de Wick* (WICK [1950], SCHWEBER [1961, § 13c]; BOGOLIUBOV and SHIRKOV [1980, § 17.2]). Ce théorème dit en substance que la contribution de l'amplitude à k interactions (III.25b) se résume simplement à des *produits* de constantes de couplage ($q_e, \gamma^\mu, etc.$) et d'*amplitudes élémentaires* de propagation (a) à une particule de Dirac :

$$\langle 0 | T \hat{\psi}_I(\xi, t) \hat{\bar{\psi}}_I(\xi', t') | 0 \rangle \equiv S_F(\xi, t; \xi', t') \quad \text{notée } \xi', t' \Longrightarrow \xi, t \tag{III.26a}$$

¹Par exemple, *chaque* $\hat{\psi}_I$ (II.9) de l'interaction (II.18b) soit crée un *positron quelconque*, soit détruit un *électron quelconque* — tous les états de Dirac pouvant en principe être utilisés, comme indiqué par la somme présente dans la définition de $\hat{\psi}_I$ (II.9).

et (b) à un photon :

$$\langle 0 | T \hat{A}_\mu(x) \hat{A}_\nu(y) | 0 \rangle \equiv D_{\mu\nu}(x; y) \quad \text{notée } y, \nu \rightsquigarrow x, \mu, \quad (\text{III.26b})$$

où les coordonnées ξ et ξ' contiennent à la fois une position d'espace et un indice de bi-spineur de Dirac (III.6) et où μ et ν sont les indices de l'opérateur 4-potentiel \hat{A} (II.10).¹

.....
 Diagrammes
 connectés
 (1)

Le théorème de Wick indique plus précisément que les amplitudes de la forme (III.25b) s'obtiennent en *appariant* les champs en propagateurs élémentaires (III.26), de (presque) toutes les manières possibles, chaque appariement étant exactement décrit par un *diagramme de Feynman*.

Plusieurs appariements élémentaires (III.26) sont possibles. Cependant, l'indice final « c » des termes (III.25b) du développement du propagateur (III.25a) indique que chaque terme doit être calculé par le théorème de Wick, mais en n'incluant que les diagrammes (appariements) « connectés » ; afin de préciser cette notion, le plus simple est de considérer un exemple.

.....
 Exemple à
 un photon

Nous allons illustrer l'application du théorème de Wick au calcul du propagateur (III.25a) en considérant le cas non trivial le plus simple d'interaction électromagnétique : celui de la propagation d'une particule de Dirac ($N = 1$ dans (III.25a)), subissant *deux interactions* avec le champ électromagnétique ($k = 2$ dans (III.25b)).

L'interaction entre charges et potentiel est représentée par le terme $\hat{j}_\mu \hat{A}^\mu$ de (II.18b), où le courant $\hat{j}_\mu(\mathbf{y}, t)$ (II.16) contient un produit d'opérateurs $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\psi}_I$ pris au même temps t , ce qui pose le problème de la définition de l'opérateur chronologique T utilisé dans le développement (III.25b) (lequel de $\hat{\psi}_I$ ou de $\hat{\psi}_I$ doit-il être appliqué en premier ?) ; nous admettrons²

¹Nous n'avons pas indiqué ici de flèche sur le propagateur du champ électromagnétique, car elle est rendue inutile par la symétrie $D_{\mu\nu}(x; y) = D_{\nu\mu}(y; x)$ [PESKIN and SCHROEDER 1995]. Le propagateur de particules de Dirac $S_F(x; y)$ ne possède pas une telle symétrie, parce que contrairement au photon, l'électron n'est pas sa propre antiparticule (voir la discussion autour de la p. 67).

²Nous n'avons trouvé que très peu de références sur le produit chronologique d'opérateurs pris à des temps *identiques* [MOHR 1985 ; MOHR *et al.* 1998 ; SHABAEV 2000, 2002] — ceci étant dû au fait qu'en QED sans potentiel extérieur, le courant est souvent défini par un *produit normal* [AKHIEZER and BERESTETSKII 1965, § 19.3] parfaitement géré par le théorème de Wick [SCHWEBER 1961]. Cependant, comme le note Shabaev [SHABAEV 2000, 2002], utiliser ce courant défini par produit normal à partir de particules de Dirac *libres* ($V(\mathbf{x}) = 0$ dans l'équation de Dirac (II.1)) donne le *même propagateur* (III.25a) que le courant (II.16), à condition d'inclure ailleurs l'effet du potentiel du noyau (potentiel externe Φ de l'interaction (II.18a) à fixer au potentiel du noyau) ; cette procédure rend superflue une définition de l'opérateur chronologique pour des temps égaux puisque le courant est alors défini avec un produit normal [SHABAEV 2000, 2002]. Pour le lien entre courant défini par un produit normal et courant défini par un commutateur, on pourra par exemple consulter MOHR [1985].

que lorsqu'il est présent à l'intérieur d'un opérateur chronologique T , le courant (II.16) peut être remplacé par une expression *sans commutateur* [MOHR *et al.* 1998] :

$$\hat{j}_\mu(\mathbf{y}, \tau) \longrightarrow \hat{\bar{\psi}}_1(\mathbf{y}, \tau) \gamma_\mu \hat{\psi}_1(\mathbf{y}, \tau), \quad (\text{III.27})$$

ce qui donne pour l'interaction électromagnétique la contribution suivante (d'ordre $k = 2$) au propagateur exact à une particule de Dirac $S_F^1(\xi, t; \xi', t')$ (III.25a) :

$$\frac{(-i)^2}{2!} \int d^4 y_1 d^4 y_2 \times \quad (\text{III.28})$$

$$\langle 0 | T \left\{ \hat{\psi}_1(\xi, t) \hat{\bar{\psi}}_1(\xi', t') \left[\hat{\bar{\psi}}_1(y_1) \gamma_\mu \hat{\psi}_1(y_1) \hat{A}^\mu(y_1) \right] \left[\hat{\bar{\psi}}_1(y_2) \gamma_\nu \hat{\psi}_1(y_2) \hat{A}^\nu(y_2) \right] \right\} | 0 \rangle_c,$$

où les intégrales sur tous les temps et toutes les positions y_1 et y_2 viennent de (III.25b) et de (II.18b) (l'opérateur chronologique s'applique aussi aux temps y_1^0 et y_2^0).

Comme indiqué plus haut, cette contribution (III.28) au propagateur $S_F^1(\xi, t; \xi', t')$ dont nous aurons besoin pour calculer la fonction de Green (III.9) peut s'évaluer en appariant de toutes les façons possibles les champs en propagateurs élémentaires (III.26). Grâce aux notations graphiques introduites plus haut (III.26), ces appariements représentent les processus physiques d'absorption et d'émission de photons suivants¹ :

$$\underbrace{\xi', t' \xrightarrow{y_1} \xrightarrow{y_2} \xi, t \quad \xi', t' \xrightarrow{y_2} \xrightarrow{y_1} \xi, t}_{\text{Diagrammes connectés}} \quad (\text{III.29a})$$

$$\underbrace{\xi', t' \xrightarrow{y_1} \xrightarrow{y_2} \xi, t \quad \xi', t' \xrightarrow{y_1} \xrightarrow{y_2} \xi, t}_{\text{Diagrammes non connectés}} \quad (\text{III.29b})$$

On remarque immédiatement que les deux derniers diagrammes (III.29b) possèdent une partie *déconnectée* de la propagation de la particule de Dirac entre (ξ', t') et (ξ, t) : ils contiennent des créations et annihilations de paires électron-positron qui n'ont physiquement *aucune influence* sur la propagation puisqu'elles n'y sont *pas connectées*. Seuls les deux premiers diagrammes (III.29a) sont « connectés » et participent — *par définition* — au développement de la contribution (III.28) au propagateur $S_F^1(\xi, t; \xi', t')$.

¹Il existe précisément deux appariements supplémentaires, obtenus en échangeant les points d'interaction y_1 et y_2 dans les deux premiers diagrammes de (III.29).

Diagrammes connectés (II) La notion de « diagramme connecté » se voit ainsi aisément sur les processus à un photon (III.29), ce qui finit de préciser le sens de l'important développement perturbatif (III.25b) du propagateur à N particules de Dirac (III.25a) : par définition, (III.25b) *doit* être calculé grâce au théorème de Wick décrit plus haut, mais où *seuls* sont pris en compte les appariements obtenus grâce aux propagations élémentaires (III.26) et dont toutes les parties sont *connectées* aux $2N$ particules de Dirac aux positions $\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t'$ (indice « c » dans l'Eq. (III.25b)) [MOHR *et al.* 1998 ; MOHR 1989].

Constante de structure fine Chaque propagateur photonique (III.26b) qui apparaît dans un diagramme de Feynman est connecté à deux points d'interaction électromagnétique ; chacun de ces points représente (grâce au théorème de Wick) un hamiltonien d'interaction \hat{H}_I^1 (II.18a) du développement perturbatif (III.25b). En conséquence, pour chaque photon d'un diagramme, un facteur q_e^2 apparaît dans sa contribution mathématique au développement (III.25b), que nous considérerons donc comme un développement en la constante de structure fine $\alpha \equiv q_e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ (qui est sans dimension et vaut environ 1/137). Ainsi par exemple, toutes les contributions dessinées dans (III.29) sont d'ordre α . Les calculs théoriques actuels de niveaux d'énergie par une méthode où l'interaction électron-noyau est traitée de façon non perturbative² sont quant à eux d'ordre α et α^2 (*cf.* section I/4.2).

Diagrammes de Feynman Comme habituellement en théorie quantique des champs, l'application concrète du théorème de Wick se réalise directement au travers de règles donnant pour chaque *diagramme* sa contribution *mathématique* exacte au propagateur (III.25a) (règles de Feynman). Nous présentons plus loin (section III/5) les règles spécifiquement associées à la méthode de la fonction de Green à deux temps.

Éléments de matrice de la fonction de Green Maintenant que nous avons vu le principe (III.25b) du calcul perturbatif de la fonction de Green (III.9), nous allons montrer qu'il est suffisant, pour obtenir les prédictions de QED sur les niveaux d'énergie atomiques, de considérer des *éléments de matrice* de la fonction de Green : les règles que nous présenterons ensuite donneront directement la contribution d'un diagramme à ces éléments *de matrice* — que nous utiliserons dans une formule

¹Nous rappelons que q_e est la charge de l'électron (II.2). Cette charge est contenue dans le courant (II.16) de l'interaction \hat{H}_I^1 .

²Les méthodes où cette interaction est traitée perturbativement utilisent des développements faisant aussi intervenir d'autres quantités (voir par exemple ZHANG *et al.* [1996]).

semblable à (III.24).

SECTION 4 (Chapitre III)

Le hamiltonien effectif

III/4.1

Éléments de matrice de la fonction de Green

III/4.1-a \diamond Principe de la restriction de la fonction de Green

Suppression
des degrés
de liberté

.....

Lorsque l'on cherche à extraire l'énergie d'un niveau atomique particulier grâce à la fonction de Green (III.17), il est inutile de laisser *libres* les positions et indices tensoriels ξ_i et ξ'_i (III.6) des particules dont on étudie la propagation ; en effet, ces coordonnées n'apparaissent que dans les *résidus* des pôles de (III.17), alors que l'on en cherche la *position* E_n (cf. section III/2.4). Nous définissons donc ici les éléments de matrice d'une fonction de Green dépendant *seulement* d'une *énergie* E (III.33) et leur lien (III.38) avec les énergies atomiques exactes.

.....

Projection
de la
fonction de
Green

Nous allons donc transformer la fonction de Green \mathcal{G}^N de (III.10) en une fonction de l'énergie E *seule*, ce qui la rendra plus simple tout en conservant l'existence des pôles dont nous cherchons la position. Ceci peut être réalisé par *projection* de la fonction de Green sur des *fonctions d'onde* à plusieurs particules. Comme nous allons calculer fonction de Green exacte (III.9) par une série de *perturbation* (cf. section III/3), il s'avérera adapté de projeter la fonction de Green sur les fonctions d'onde *non perturbées* (N électrons sans interaction autre que celle de l'équation de Dirac (II.1)). Cela vient du fait que toutes les quantités physiques élémentaires (fonctions d'onde, énergies) qui apparaissent dans le développement (III.25b) du propagateur sont définies à partir de la théorie *sans interaction* entre charges et photons.

Malgré l'usage de projections sur des fonctions d'onde *non perturbées*, nous verrons (III.38) qu'il reste possible de remonter aux énergies atomiques *exactes* depuis les éléments de matrice de la fonction de Green ainsi obtenus.

.....

Présentation
simplifiée

Nous nous inspirerons dans cette section de la référence [SHABAEV 1994], tout en en modifiant légèrement le formalisme dans un souci de clarification et de simplification ; nous indiquerons à chaque fois là où notre présentation modifie les démonstrations originales.

III/4.1-b \diamond Restriction dans le cas non perturbé

Afin de savoir comment réaliser la suppression des degrés de liberté autres que E de la fonction de Green définie dans l'Eq. (III.9), il est instruc-

tif d'étudier d'abord cette quantité \mathcal{G}^N dans le cas le plus simple, à savoir celui où l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) entre charges et photons est négligée.

Fonctions
d'onde
comme
résidus

Dans cette situation, tous les objets manipulés par la théorie que nous avons présentée jusqu'ici possèdent des définitions explicites (section II/1.2), si bien que nous avons abouti au résultat suivant lequel la dépendance de la fonction de Green non perturbée (III.19) en les positions et indices ξ_i et ξ'_i est simplement donnée par des fonctions d'onde (*cf.* Eq. (III.20)). Ainsi, le résidu venant de l'énergie de N électrons $|\mathbf{n}_0\rangle = |n_N, \dots, n_1\rangle$ (placés dans le champ du noyau de (II.1)) est un simple produit de deux fonctions d'onde (non normalisées) : d'après la fonction de Green non perturbée (III.19) et le calcul explicite (III.20), ce résidu en $E_{\mathbf{n}}$ vaut

$$\begin{aligned} & \langle 0 | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n}_0 \rangle \langle \mathbf{n}_0 | \hat{\bar{\psi}}(\xi'_N) \cdots \hat{\bar{\psi}}(\xi'_1) | 0 \rangle \\ &= \left(\sum_{\sigma} (-1)^{\sigma} \phi_{n_{\sigma(1)}}(\xi_1) \cdots \phi_{n_{\sigma(N)}}(\xi_N) \right) \left(\sum_{\sigma'} (-1)^{\sigma'} \bar{\phi}_{n_{\sigma'(N)}}(\xi'_N) \cdots \bar{\phi}_{n_{\sigma'(1)}}(\xi'_1) \right). \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

Projection
et produit
scalaire

Afin de pouvoir projeter la fonction d'onde de (III.30), qui contient des adjoints de Dirac $\hat{\bar{\psi}}_I$ (II.17), il est pratique¹ de les transformer en adjoints hermitiens, car nous aurons ainsi accès aux relations d'orthogonalité entre bi-spineurs de Dirac ; cela s'effectue par une simple multiplication par la matrice de Dirac γ^0 , puisque celle-ci est son propre inverse² :

$$\phi_n^{\dagger} = (\phi_n^{\dagger} \gamma^0) \gamma^0 = \bar{\phi}_n \gamma^0, \quad (\text{III.31})$$

où nous avons utilisé la définition (II.15) de l'adjoint de Dirac.

Nous pouvons grâce à (III.31) utiliser l'orthonormalisation des fonctions d'onde stationnaires ϕ_n de l'équation de Dirac (II.1) sous la forme suivante³ :

$$\int d\xi \phi_n^{\dagger}(\xi) \phi_{n'}(\xi) = \int d\xi \bar{\phi}_n(\xi) [\gamma^0 \phi_{n'}](\xi) = \begin{cases} 1 & \text{si } n = n' \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (\text{III.32})$$

où l'intégrale sur la coordonnée ξ est définie par *intégration* sur tous les points d'espace et *sommation* sur les quatre indices spinoriels possibles (*cf.* (III.6)). D'après la forme explicite des résidus (III.30), l'application

¹Nous suivons ici la convention établie ARTEMYEV *et al.* [2000] de SHABAEV [1990a]. Travailler avec des adjoints hermitiens serait cependant plus pratique — comme en particulier dans la définition (III.33) ci-dessous.

²Par définition de l'algèbre (de Clifford) des matrices γ de Dirac [MESSIAH 1964, § XX-8], nous avons $(\gamma^0)^2 \equiv g^{00}$, où g est le tenseur métrique de l'espace de Minkowski ; comme nous choisissons la convention selon laquelle les intervalles du genre temps sont positifs, $g^{00} = 1$, si bien qu'on a effectivement $(\gamma^0)^2 = 1$.

³Afin de ne pas nous encombrer de détails inutiles à notre propos, nous faisons comme si les états prédits par l'équation de Dirac étaient *discrets*. Voir aussi la note 1, p. 47.

de (III.32) aux fonctions d'onde à N électrons se fait naturellement en calculant l'élément de matrice suivant :

$$\begin{aligned} & \int d\xi_1 \cdots d\xi_N d\xi'_N \cdots d\xi'_1 \left\{ \phi_{n_1}^\dagger(\xi_1) \cdots \phi_{n_N}^\dagger(\xi_N) \right\} \\ & \times \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E) \left\{ [\gamma^0 \phi_{n'_N}](\xi'_N) \cdots [\gamma^0 \phi_{n'_1}](\xi'_1) \right\} \quad (\text{III.33}) \\ & \equiv \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle \end{aligned}$$

que je définis¹ pour des états propres *non perturbés* (i. e. de \hat{H}_0 (II.12)) de la forme particulière (cf. (II.3))

$$|\mathbf{n}_0\rangle \equiv |n_N, \dots, n_1\rangle \quad \text{et} \quad |\mathbf{n}'_0\rangle \equiv |n'_N, \dots, n'_1\rangle \quad (\text{III.34})$$

(l'ordre d'énumération a son importance, comme nous l'avons vu dans l'Eq. (II.4)); les *fonctions d'onde* utilisées représentent les états stationnaires (connus) ϕ de l'équation de Dirac (II.1). (L'usage du produit tensoriel de matrices γ^0 indique simplement que *chaque* bi-spineur de $|\mathbf{n}'_0\rangle$ doit se voir appliquer *individuellement* γ^0 — juste afin de pouvoir bientôt utiliser la relation d'orthogonalité sous la forme (III.32).)

Comme les listes d'états propres de Dirac des kets non perturbés (III.34) ne sont *pas uniques* (cf. (II.4)), l'élément de matrice de (III.33) n'est *a priori* pas défini de manière non ambiguë. Il est possible de voir que les Eqs. (III.33) et (III.33) définissent en fait *correctement* les éléments de matrice de la fonction de Green, en constatant que les changements de signe (II.4) dans les états de Fock sont exactement contrebalancés par l'antisymétrie² du propagateur (III.25a) — et donc de la fonction de Green (III.9) — par rapport aux coordonnées (ξ_1, \dots, ξ_N) d'une part et (ξ'_1, \dots, ξ'_N) d'autre part.

Contrairement à SHABAEV [2002, 2000, 1994], je préfère rendre non ambigu le fait que le produit scalaire utilisé ici est de nature différente³ de celui de l'espace de Fock utilisé auparavant (voir par exemple (III.7) ou (III.17)), puisqu'il porte sur des *fonctions de N coordonnées ξ* (III.6); ainsi, j'ai utilisé dans l'élément de matrice (III.33) un bra et un ket distinct pour la « fonction d'onde »

$$|\mathbf{n}'_0\rangle \longleftrightarrow [(\xi'_1, \dots, \xi'_N) \mapsto \phi_{n'_N}(\xi'_N) \cdots \phi_{n'_1}(\xi'_1)] \quad (\text{III.35})$$

¹La définition des éléments de matrice de Green par Shabaev [SHABAEV 1988b, 1990a, 2000, 2002] utilise l'équivalent de fonctions d'onde anti-symétrisées (déterminants de Slater) qui complique inutilement les calculs de niveaux d'énergie (noter par exemple les facteurs $1/N!$ et les règles de sélection dans SHABAEV [2000, § II.B]).

²L'antisymétrie du propagateur (III.25a) par rapport aux coordonnées est directement liée à la définition de l'opérateur chronologique T pour des temps *égaux*; on trouve dans MOHR *et al.* [1998, p. 238] une définition qui se généralise par moyenne antisymétrisée : pour des opérateurs pris aux mêmes temps, $T[A_1 \cdots A_N] \equiv \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} (-1)^{\sigma} A_{\sigma(1)} \cdots A_{\sigma(N)}$, où la somme est sur toutes les permutations.

³Les articles publiés sur la fonction de Green utilisent un ket $|\rangle$ à la place de la notation $|\rangle$ introduite ici.

associée à l'état *de Fock* $|\mathbf{n}'_0\rangle = |n'_N, \dots, n'_1\rangle$.¹

Sélection
des pôles

Notons enfin que le produit scalaire (III.33) a permis comme annoncé de construire explicitement une fonction de l'énergie E *seule*, plus simple à manier que la fonction de Green initialement définie (III.9). Cette fonction plus simple (III.33) permet toujours de remonter aux niveaux d'énergie des atomes à N électrons, dans le cas non perturbé — nous verrons bientôt qu'elle suffit aussi dans le cas général. En effet, la forme spéciale (III.30) des résidus et la relation d'orthonormalité (III.32) donnent pour deux états propres *électroniques*² $|\mathbf{n}_0\rangle$ et $|\mathbf{n}'_0\rangle$ de la forme simple (II.3) :

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle \\ &= \begin{cases} \frac{\pm 1}{E - ((\varepsilon_{n_1} + \dots + \varepsilon_{n_N}) - i0)} & \text{si } |\mathbf{n}_0\rangle = \pm |\mathbf{n}'_0\rangle \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

dans le cas *non perturbé* (interaction \hat{H}_S^I supprimée du hamiltonien (II.27)) ; nous avons noté les électrons individuels selon la convention (III.34).³ La relation (III.36) nous dit que si l'on cherche à retrouver l'énergie $\varepsilon_{n_1} + \dots + \varepsilon_{n_N}$ d'un état propre $|\mathbf{n}_0\rangle$ à N électrons en utilisant la fonction de Green projetée (III.33), il est *nécessaire* de calculer l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0 \rangle$, car c'est le seul qui contient le pôle en l'énergie (non perturbée) des N électrons de $|\mathbf{n}_0\rangle$. Nous supposons que le résultat (III.36) sur la fonction de Green *non perturbée* va être peu modifié par l'interaction \hat{H}_S^I de (II.27), si bien que le calcul de seulement quelques éléments de matrice semblables à (III.36) suffiront de même à obtenir les

¹Comme les fonctions de (III.35) ne servent, dans la méthode de la fonction de Green à deux temps, qu'à effectuer des produits scalaires, il ne nous apparaît pas nécessaire de les antisymétriser ; nous nous écartons ici du formalisme habituel [SHABAEV 2002, 2000, 1990a]. De plus, l'absence d'antisymétrisation rend naturellement certains calculs plus simples — comme par exemple la définition (III.33).

²Nous entendons par là : composés de N électrons, sans positrons — puisque ce sont les états sélectionnés dans le premier terme de la fonction de Green (III.19).

³Bien que nous n'ayons pas choisi exactement la même définition de la fonction de Green (III.9), ni la même définition des fonctions d'onde (III.35), l'élément de matrice (III.36) a la même valeur ici que dans le formalisme de Shabaev [SHABAEV and FOKEEVA 1994] ; ceci est dû au fait que le facteur $1/N!$ utilisé par Shabaev dans la fonction de Green compense les $N!$ permutations qu'il utilise pour définir les fonctions d'onde.

énergies des niveaux atomiques qui nous intéressent, sous la forme de *pôles* de l'élément de matrice (III.33).

III/4.1-c \diamond **Restriction de la fonction de Green avec interaction**

.....
 Éléments de
 matrice de
 la fonction
 de Green

Afin de trouver les niveaux atomiques situés aux pôles de la fonction de Green *exacte* (III.17), mais au travers d'*éléments de matrices* semblables à celui du cas non perturbé (III.36), il est naturel de considérer les éléments de matrice

$$\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0 \rangle, \quad (\text{III.37})$$

calculés maintenant avec la fonction de Green *exacte* (III.10), mais toujours avec les états propres *non perturbés* $|\mathbf{n}_0\rangle$ — car ceux-ci sont d'une part connus explicitement, et d'autre part pratiques pour utiliser le développement perturbatif (III.25b) réalisé en terme de quantités non perturbées. Si l'on suppose que l'interaction \hat{H}_I^1 (II.18a) entre charges et photons perturbe peu le hamiltonien sans interaction \hat{H}_0 (II.12), les états propres¹ $|\mathbf{n}\rangle$ de \hat{H} (d'énergie $E_{\mathbf{n}}$) venant de l'état propre $|\mathbf{n}_0\rangle$ de \hat{H}_0 par branchement de l'interaction *donnent à (III.37) des pôles aux énergie exactes* $E_{\mathbf{n}}$ (puisque cette propriété est vérifiée d'après (III.36) à la limite d'une interaction nulle entre charges et photons).

Nous avons ainsi obtenu pour chaque état atomique non perturbé $|\mathbf{n}_0\rangle$ de \hat{H}_0 (II.12) une fonction (III.37) de l'énergie E *seule* — plus pratique que (III.10) — qui peut en principe donner les énergies des états atomiques $|\mathbf{n}\rangle$ qui viennent de l'état propre $|\mathbf{n}_0\rangle$ en l'absence d'interaction : les énergies $E_{\mathbf{n}}$ de ces états s'obtiennent grâce à la formule (III.24) d'extraction de pôle que nous avons vue plus haut, appliquée à (III.37) avec $g(E) \equiv \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0 \rangle$ (qui possède un pôle aux énergies propres exactes $E_{\mathbf{n}}$) :

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE E \times \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0 \rangle}{\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_n} dE \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0 \rangle}, \quad (\text{III.38})$$

où les éléments de matrice sont définis explicitement dans l'Eq. (III.33). Ce résultat constitue un pas vers un calcul *perturbatif* des énergies atomiques, puisque l'état *non perturbé* $|\mathbf{n}_0\rangle$ (III.34) permet d'obtenir des énergies exactes $E_{\mathbf{n}}$.

Cependant, le problème posé par la formule (III.24) demeure (*cf.* p. 83) : le contour Γ_n du plan E qui permet d'extraire la position de l'énergie atomique $E_{\mathbf{n}}$ prédite par QED doit contenir $E_{\mathbf{n}}$ alors que cette valeur est

¹Les états *dégénérés* de \hat{H}_0 (II.12) donnent en général plusieurs états propres du hamiltonien total \hat{H} (II.27) lors du branchement de l'interaction \hat{H}_S^1 (II.26).

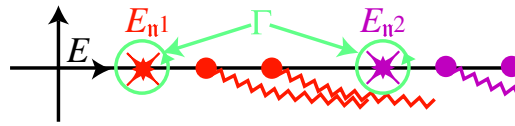


FIG. III.7 – Contour utilisé dans la définition du hamiltonien effectif (III.39a). Les énergies exactes de s niveaux atomiques quasi-dégénérés ou dégénérés s’obtiennent comme les valeurs propres d’un hamiltonien effectif construit avec une intégrale sur un contour Γ qui encercle (dans le sens positif) chacune des énergies exactes E_{n1}, \dots, E_{ns} . Nous avons représenté ici deux énergies atomiques exactes E_{n1} et E_{n2} , ainsi que les coupures dues à des états à un et deux photons (nous n’avons pas représenté les coupures, créées par des états propres contenant encore plus de photons).

inconnue, si bien que la formule (III.38) reste *théorique* et demande des aménagements afin d’être utilisée de façon pratique.

III/4.2

Hamiltonien effectif

Nécessité
d’un
hamiltonien
effectif

La formule théorique (III.38) de calcul des niveaux d’énergie permet en principe d’obtenir grâce à (III.25b) un développement perturbatif (en l’interaction (II.26)) donnant l’énergie d’un niveau atomique état propre du hamiltonien (II.27) de l’électrodynamique quantique des états liés. Mais il est bien connu (voir par exemple MESSIAH [1964]) que lorsque la perturbation devient importante devant l’écart entre certains niveaux atomiques non perturbés (cas « quasi-dégénéré »¹), ou bien lorsque plusieurs états non perturbés sont dégénérés, il est nécessaire d’obtenir *simultanément* les énergies de tous les niveaux si l’on veut aboutir à des calculs perturbatifs pertinents.

Hamiltonien
effectif et
fonction de
Green

Obtenir *simultanément* la valeur perturbée de plusieurs niveaux d’énergie à partir des *singularités* d’une fonction comme celle dont nous disposons ici (III.17) peut se faire en construisant un *hamiltonien effectif* dont les valeurs propres donnent les niveaux perturbés, suivant une procédure utilisée initialement pour ses propriétés mathématiques (voir par exemple DE SZÖKEFALVI-NAGY [1947], KATO [1949], MESSIAH [1964, § XVI-15] et SHABAEV [1993]).

Afin de faciliter les applications de la méthode de la fonction de Green à deux temps, nous donnons tout d’abord la *définition* du hamiltonien ef-

¹Par exemple, l’hélium et les héliumoides (à bas et moyen nombre de charge Z) sont des systèmes où les niveaux $(1s2p_{1/2})_{J=1}$ et $(1s2p_{3/2})_{J=1}$ sont quasi-dégénérés [ARTEMYEV *et al.* 2000].

fectif (section III/4.2-a) ; dans la section suivante (section III/4.2-b), nous prouvons pour référence sa propriété fondamentale, qui est de donner les énergies atomiques par *diagonalisation* (nous ferons usage de notre formalisme fondé sur le produit scalaire (III.33) explicite et les fonctions d'onde simplifiées (III.35)).

III/4.2-a \diamond Définition du hamiltonien effectif

La méthode présentée ici [SHABAEV 1993] est en substance une extension simple de la formule (III.38) donnant *un* niveau : pour extraire *plusieurs* niveaux à partir de plusieurs *pôles*, il suffit de remplacer la fonction *scalaire* $g(E)$ de (III.24) par une *matrice*. Ainsi, les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, \mathbf{n}^s}$ obtenues par branchement de l'interaction entre charges et photons \hat{H}_S^I (II.26) à partir de s états non perturbés *quasi-dégénérés ou dégénérés* $|\mathbf{n}_0^1\rangle, \dots, |\mathbf{n}_0^s\rangle$ (états propres du hamiltonien non perturbé \hat{H}_0 (II.12) de la forme *simple* (III.34)) sont les *valeurs propres* du hamiltonien « effectif »

$$H_{\text{eff}} \equiv \frac{1}{\sqrt{P}} K \frac{1}{\sqrt{P}}, \quad (\text{III.39a})$$

qui est bien sûr une matrice $s \times s$ (pour donner s valeurs propres). Ce « hamiltonien effectif » (III.39a) *n'est a priori pas* la restriction du hamiltonien \hat{H} (II.27) aux états non perturbés étudiés ($|\mathbf{n}_0^1\rangle, \dots, |\mathbf{n}_0^s\rangle$) ; dans le formalisme de la méthode de la fonction de Green à deux temps, il s'agit simplement d'un outil mathématique qui donne par diagonalisation les énergies $E_{\mathbf{n}^1, \dots, \mathbf{n}^s}$ des niveaux exacts ($|\mathbf{n}^1\rangle, \dots, |\mathbf{n}^s\rangle$).

Contour

Avant de donner la définition des matrices P et K , nous avons besoin de définir, comme pour (III.38), un *contour* qui entoure individuellement chacune des énergies auxquelles on s'intéresse dans le sens positif (les énergies dégénérées doivent être entourées une seule fois — cf. section III/4.2-b.). De la même façon que le contour Γ_n des formules (III.24) et (III.38) entourait l'*unique* niveau E_n que l'on cherchait, le contour Γ entoure par définition *chacun des niveaux* exacts $E_{\mathbf{n}^1, \dots, \mathbf{n}^s}$ (cf. figure III.7). Le contour que je propose ici diffère de ceux définis par SHABAEV [1993] ; SHABAEV and FOKEEVA [1994] : les contours utilisés dans la littérature sur la méthode de la fonction de Green à deux temps ne sont en effet pas adaptés à la fois aux calculs perturbatifs et aux calculs exacts (théoriques) de la fonction de Green (cf. section IV/2).

Numérateur
et dénomi-
nateur

La matrice K est définie grâce à ce contour Γ par une généralisation simple du *numérateur* de la formule théorique (III.38) :

$$K_{ij} \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE E \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes_N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle. \quad (\text{III.39b})$$

III/4. Le hamiltonien effectif

(K est ainsi une matrice $s \times s$ dont chaque élément est associé à deux états propres $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ de \hat{H}_0 .) De la même manière, la matrice P est l'analogie du *dénominateur* de (III.38) :

$$P_{ij} \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dE \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes_{\gamma^0}^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle. \quad (\text{III.39c})$$

Nous rappelons que la définition explicite des éléments de matrice de la fonction de Green utilisée dans (III.39b) et (III.39c) est donnée par l'Eq. (III.33).

La définition du hamiltonien effectif (III.39a) est une généralisation de la formule (III.24) que nous avons obtenue dans la section III/2.4 pour un niveau isolé (voir la définition (III.39b) du numérateur K et la définition (III.39c) de ses dénominateurs P). De manière analogue au mécanisme que nous avons vu dans la section III/2.4, la matrice P des dénominateurs de (III.39a) sert à faire disparaître de K la contribution des résidus aux pôles de la fonction de Green, de façon à ne conserver dans H_{eff} que les énergies atomiques que contient aussi K .

.....

Difficultés Nous donnerons bientôt (section IV/2.2) une solution au problème mentionné p. 83 et qui joue toujours dans la généralisation à plusieurs niveaux atomiques que nous venons de présenter : on ne connaît pas à l'avance les énergies exactes prédites par QED, si bien que l'on ne peut pas calculer de façon évidente les matrices K et P puisque l'on ne sait pas où doit se trouver le contour multiple Γ . La construction (III.39) est *auto-cohérente* mais ne donne pas accès aux énergies exactes. Nous consacrons la section IV/2 à cette question.

.....

Avantages du hamiltonien effectif La possibilité de construire un hamiltonien effectif (III.39a) qui donne par ses valeurs propres les énergies de plusieurs niveaux atomiques dégénérés ou quasi-dégénérés (avec \hat{H}_0 (II.12) comme hamiltonien principal et \hat{H}_S^I (II.26) comme perturbation) est l'un des grands avantages de la méthode de la fonction de Green à deux temps, partagé seulement par la récente méthode de Lindgren, en cours de développement et de mise en pratique [LINDGREN 2000] — *cf.* section II/2.2.

III/4.2-b \diamond Construction du hamiltonien effectif

Maintenant que nous avons commenté intuitivement la définition du hamiltonien (III.39a), nous allons prouver qu'il donne effectivement par diagonalisation les énergies propres exactes $E_{n^1, \dots, s}$ obtenues par branchement de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) à partir d'états propres de \hat{H}_0 (II.12) $|\mathbf{n}_0^1\rangle, \dots, |\mathbf{n}_0^s\rangle$ (de la forme (III.34)).

La construction de ce hamiltonien constitue essentiellement un procédé de calcul de la *position* des pôles simples d'une fonction — pour une autre approche de cette question, moins pratique que la méthode présentée ici, voir

par exemple YENNIE [1989]. Notre discussion est adaptée au cas particulier de la fonction de Green à deux temps (III.17) ; nous illustrerons concrètement dans le chapitre IV le calcul du hamiltonien effectif en évaluant la contribution de plusieurs diagrammes. La présentation qui suit est inspirée de celle de SHABAEV [1993], à laquelle nous ajoutons des précisions.

.....
 Principe De façon similaire à ce que nous avons vu dans la section III/4.1, nous allons obtenir en *deux* étapes les énergies (exactes, *i. e.* de (II.27)) où se trouvent certains pôles de la fonction de Green (III.17) : nous construisons d'abord des éléments de matrice (III.33) dépendant seulement du paramètre d'énergie E de la fonction de Green, puis nous extrayons la positions des pôles par une intégrale de contour (semblable à (III.38)).

.....
 Éléments de matrice de la fonction de Green Par définition, le hamiltonien (III.39a) est construit à partir d'éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green — au travers de K (III.39b) et P (III.39c) ; nous allons réécrire ces matrices sous une forme simple qui permettra de comprendre la construction de H_{eff} (III.39a). L'expression non perturbative générale (III.17) montre que les intégrations du produit scalaire de (III.33) ne concernent que les *résidus* de la fonction de Green, si bien que l'élément de matrice (III.33) peut s'écrire

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}^N(E) \bigotimes_{\gamma^0} | \mathbf{n}_0^j \rangle \\ &= \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } Nq_e}} \frac{\langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{él}} \rangle \langle \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle}{E - (E_{\mathbf{n}} - i0)} - (-1)^N \sum_{\substack{|\mathbf{n}\rangle \text{ de} \\ \text{charge } -Nq_e}} \frac{\langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{pos}} \rangle \langle \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{pos}} | \mathbf{n}_0^j \rangle}{E - (-E_{\mathbf{n}} + i0)} \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

(noter la similarité formelle avec la résolvante d'un hamiltonien) où nous avons inclus les intégrations de (III.33) dans les produits scalaires suivants :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{él}} \rangle &\equiv \int d\xi_1 \cdots d\xi_N \left\{ \phi_{n_1^i}^\dagger(\xi_1) \cdots \phi_{n_N^i}^\dagger(\xi_N) \right\} \langle \Omega | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \mathbf{n} \rangle \\ \langle \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle &\equiv \langle \mathbf{n}_0^j | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{él}} \rangle^* \end{aligned} \quad (\text{III.41a})$$

et, pour les états propres à N positrons :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{pos}} \rangle &\equiv \int d\xi_1 \cdots d\xi_N \left\{ \phi_{n_1^i}^\dagger(\xi_1) \cdots \phi_{n_N^i}^\dagger(\xi_N) \right\} \langle \mathbf{n} | \hat{\psi}(\xi_1) \cdots \hat{\psi}(\xi_N) | \Omega \rangle \\ \langle \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{pos}} | \mathbf{n}_0^j \rangle &\equiv \langle \mathbf{n}_0^j | \varphi_{\mathbf{n}}^{\text{pos}} \rangle^*, \end{aligned} \quad (\text{III.41b})$$

où nous avons noté $n_{1,\dots,N}^i$ les N états individuels (ordonnés) de Dirac qui composent l'état propre *non perturbé* $|\mathbf{n}_0^i\rangle$, selon la convention déjà employée (III.34) ; nous rappelons que les intégrations sur les ξ (III.6) imposent par définition d'intégrer sur les coordonnées spatiales des bi-spineurs

de Dirac ainsi que de sommer sur les quatre composantes de ces bi-spineurs, comme dans (III.32).

D'après notre discussion de la p. 76, les produits scalaires qui apparaissent dans (III.41) représentent des *recouvrements* entre les fonctions d'onde non perturbées associées aux états de Fock $|\mathbf{n}^1, \dots, s\rangle$ et les sortes de fonctions d'onde exactes de la fonction de Green (III.17).

La formule (III.40) ne sert qu'à la construction *théorique* du hamiltonien effectif (III.39a); en effet, les énergies exactes E_n sont celles de l'atome ou ion à N électrons étudié et sont inconnues, tout comme les états propres exacts $|\mathbf{n}\rangle$ du hamiltonien \hat{H} (II.27) de l'électrodynamique des états liés, que nous utilisons dans (III.41). Nous consacrons le chapitre IV aux calculs perturbatifs *concrets* de H_{eff} , qui demandent de développer d'autres procédés que ceux utilisés dans la construction de principe que nous présentons ici.

.....

Contour d'intégration Afin d'exprimer simplement les matrices K (III.39b) et P (III.39c) à l'aide de (III.40), il nous faut définir précisément le contour Γ d'intégration.

L'intégration le long du contour multiple Γ (*cf.* figure III.7) sert à isoler les s niveaux exacts des autres niveaux, auxquels nous ne nous intéressons pas (on reconnaît une généralisation simple de la procédure utilisée p. 82). Comme indiqué p. 95, nous définissons Γ comme entourant *une seule fois* (dans le sens positif) chaque énergie exacte $E_{n^1, \dots, s}$, *même si elle est dégénérée* — ce point n'est pas explicite, dans les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps, mais il est crucial, comme nous allons le voir.

Se pose en effet le problème suivant : lorsque l'on fait varier la valeur du couplage q_e contenu dans le courant (II.16) de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26), certains des niveaux exacts $E_{n^1, \dots, s}$ peuvent se croiser (comme par exemple en $q_e = 0$ pour les niveaux dégénérés — voir par exemple la figure IV.3, p. 129); or si l'on entoure chacun de ces niveaux d'un contour, faut-il entourer l'énergie commune qu'ils prennent pour une certaine valeur de q_e *plusieurs fois*, d'un nombre égal à la dégénérescence de cette énergie, comme on pourrait songer naturellement à le faire? Cette question est illustrée dans la figure III.8, p. 101; pour y répondre (par la négative), il est nécessaire de calculer le hamiltonien effectif en suivant les Eqs. (III.39), comme nous le faisons ci-dessous.

.....

Matrices K et P Avec le contour d'intégration défini p. 95 et la fonction de Green sous sa forme (III.40), les matrices K (III.39b) et P (III.39c) se calculent immédiatement grâce au théorème des résidus; on obtient ainsi les matrices

$s \times s$ suivantes :

$$K_{ij} = \sum_{k=1}^s \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle E_{\mathbf{n}^k} \langle \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (\text{III.42a})$$

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^s \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle \langle \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle, \quad (\text{III.42b})$$

où l'intégration de contour sur Γ a sélectionné uniquement les s états propres $|\mathbf{n}^{1,\dots,s}\rangle$ d'énergies $E_{\mathbf{n}^1,\dots,s}$ qui nous intéressent. Si l'énergie exacte $E_{\mathbf{n}^k}$ était entourée μ_k fois par le contour Γ (par exemple pour tenir compte de sa dégénérescence), le terme k serait simplement multiplié par μ_k ; nous explicitons dans (III.42) uniquement le choix $\mu_{1,\dots,s} = 1$ fait p. 95, car il s'avérera être le plus pratique.

.....
Construction
du
hamiltonien
effectif

Extraire les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^k}$ des matrices $s \times s$ (III.42) est un problème d'algèbre qui peut être résolu [SHABAEV 1993] en remarquant d'abord qu'elles sont construites à partir de s vecteurs (en colonne)

$$\varphi_k \in \mathbb{C}^s \text{ de composantes } i \mapsto \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle$$

(ces composantes peuvent s'interpréter comme des *recouvrements* entre fonctions d'onde approchées et exactes, ainsi que nous l'avons indiqué après (III.41)). On a en effet avec ces vecteurs

$$K = \sum_{k=1}^s \varphi_k E_{\mathbf{n}^k} \varphi_k^\dagger \quad P = \sum_{k=1}^s \varphi_k \varphi_k^\dagger. \quad (\text{III.43})$$

Si la perturbation \hat{H}_S^I (II.26) n'est pas trop forte, les vecteurs $\varphi_{1,\dots,s}$ forment une *base* de \mathbb{C}^s : c'est en effet le cas lorsque l'interaction est nulle ($\hat{H}_S^I = 0$), ainsi qu'on peut le voir à partir de (III.20) et des définitions des composantes des vecteurs $\varphi_{1,\dots,s}$ (III.41a). En conséquence, il est possible d'utiliser, pour simplifier l'étude des matrices K et P (III.43), la *base duale* des vecteurs $\varphi_{1,\dots,s}$ à s composantes; en notant $v_{1,\dots,s}$ cette base duale, nous avons par définition

$$\varphi_k^\dagger v_{k'} = \delta_{k,k'}, \quad (\text{III.44})$$

où δ est le symbole de Kronecker. Les matrices K et P (III.43) agissent simplement sur cette base :

$$K v_k = E_{\mathbf{n}^k} \varphi_k \quad P v_k = \varphi_k. \quad (\text{III.45})$$

Les énergie exactes $E_{\mathbf{n}^1,\dots,s}$ s'obtiennent alors comme valeurs propres, puisque d'après (III.45)

$$K v_k = E_{\mathbf{n}^k} P v_k,$$

si bien que [SHABAEV 1993]

$$\left[\frac{1}{\sqrt{P}} K \frac{1}{\sqrt{P}} \right] (\sqrt{P} v_k) = E_{\mathbf{n}^k} (\sqrt{P} v_k). \quad (\text{III.46})$$

(La matrice P possède bien une racine carrée qui est de plus inversible, d'après la forme donnée dans (III.43) et grâce au fait que les φ_k forment par hypothèse une base de \mathbb{C}^s .) L'Eq. (III.46) montre bien que le hamiltonien défini dans (III.39) donne par diagonalisation les s énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}$ des états propres $|\mathbf{n}^1, \dots, s\rangle$ (du hamiltonien de l'électrodynamique quantique des états liés (II.27)).

Lorsque nous appliquerons concrètement la méthode de la fonction de Green à deux temps (chapitre IV), nous n'aurons besoin pour calculer le hamiltonien (III.39a) que des matrices K (III.39b) et P (III.39c) — les vecteurs $\varphi_{1, \dots, s}$, leurs coordonnées (III.41) et la base duale $v_{1, \dots, s}$ (III.44) ne nous servent qu'à prouver que le hamiltonien effectif (III.39a) possède comme valeurs propres les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}$.

.....
 Choix du
 contour
 d'intégration

Maintenant que nous avons illustré la construction du hamiltonien H_{eff} (III.39a) avec un contour Γ entourant *une seule fois* les énergies exactes, nous pouvons mieux voir les conséquences qu'aurait une définition employant un contour où chaque énergie exacte $E_{\mathbf{n}^k}$ est entourée μ_k fois¹ (un choix naturel serait par exemple de prendre μ_k égal à la dégénérescence de $E_{\mathbf{n}^k}$, comme illustré dans la figure III.8). À la place de (III.42), le théorème des résidus donnerait alors avec la fonction de Green (III.40) des matrices K (III.39b) et P (III.39c) qui valent

$$K_{ij} = \sum_{k=1}^s \mu_k \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle \langle E_{\mathbf{n}^k} | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (\text{III.47a})$$

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^s \mu_k \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle \langle \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} | \mathbf{n}_0^j \rangle, \quad (\text{III.47b})$$

si bien qu'on peut mettre les matrices K et P exactement sous la même forme (III.43) qu'avec le contour Γ ($\mu_{1, \dots, s} = 1$) défini p. 95 — il suffit de définir des vecteurs $\varphi_k \in \mathbb{C}^s$ de composantes $i \mapsto \sqrt{\mu_k} \langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle$. Finalement, avec un contour entourant plusieurs fois certaines des énergies exactes, on construirait un hamiltonien (III.39a) différent de celui défini avec Γ , mais possédant toujours d'après (III.46) les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}$ comme valeurs propres.

La raison du choix fait p. 95 de n'entourer qu'une seule fois chaque énergie avec le contour Γ (même si l'énergie en question est dégénérée) ne provient donc *pas* du besoin de définir un hamiltonien effectif — de la façon *non perturbative* que nous venons de présenter.

¹Si deux énergies sont dégénérées ($E_{\mathbf{n}^k} = E_{\mathbf{n}^{k'}}$), elles sont entourées d'un nombre fixé de contours qui impose $\mu_k = m \mu_{k'}$.

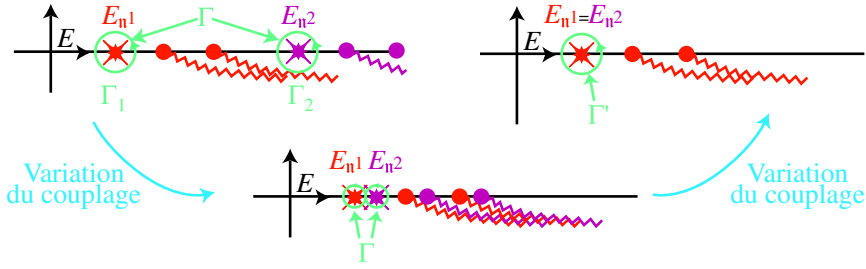


FIG. III.8 – Contour Γ de la définition du hamiltonien effectif (III.39a). Nous avons représenté, pour plusieurs valeurs du couplage q_e — cf. (II.16) et (II.18b) —, des singularités créées dans la structure analytique de la fonction de Green par les énergies propres E_{n1} et E_{n2} du hamiltonien (II.27). Ces deux énergies sont *isolées* pour la valeur du couplage q_e choisie dans la figure de gauche, mais *dégénérées* pour une autre valeur, comme dessiné à droite. Pour obtenir la continuité des matrices K (III.39b) et P (III.39c), les *deux* contours Γ^1 et Γ^2 qui les entourent pour la valeur du couplage utilisée dans le cas non dégénéré de gauche doivent se rassembler en un *unique* contour Γ' , dessiné à droite. Tout comme dans la figure figure III.7, nous n'avons représenté que les états contenant entre zéro et deux photons.

La raison que j'ai trouvée pour justifier le contour Γ — qui est implicitement défini dans la littérature [SHABAEV 1993] comme entourant *une seule fois* chaque énergie — est liée au besoin d'utiliser pour le calcul de la fonction de Green (III.10) et des matrices K (III.39b) et P (III.39c) des *développements perturbatifs* — fonctions de la constante de structure fine α . En effet, pour calculer perturbativement le hamiltonien effectif (III.39a), il est nécessaire que les matrices K et P soient (au moins) *continues* par rapport à α ; or, on voit clairement sur la forme (III.47a) de ces matrices qu'il est besoin pour cela que le nombre de fois μ_k qu'est entourée l'énergie E_{nk} soit *constant* par rapport à α (l'état propre $|n^k\rangle$ étant supposé continu par rapport au couplage α , ainsi que son énergie E_{nk}). Une façon de réaliser cette contrainte consiste à choisir de toujours entourer les énergies une seule fois ($\mu_k = 1$), même quand elles sont dégénérées, comme illustré dans la figure III.8.

Mentionnons (pour terminer notre discussion sur le choix du contour d'intégration Γ) qu'entourer les énergies une seule fois dans P (III.39c) possède une autre vertu : cela permet d'avoir $P = \mathbf{1}_s$ en l'absence de couplage (interaction \hat{H}_S^I (II.26) prise nulle), ce qui facilite le calcul perturbatif de $1/\sqrt{P}$ dans le hamiltonien effectif (III.39a) — le développement des fonctions puissance est simple autour de la valeur 1. Ce résultat sur P provient simplement du fait que si $\hat{H}_S^I = 0$, on peut prendre comme états

propres $|\mathbf{n}^{1,\dots,s}\rangle$ de \hat{H} (II.27), les états propres non perturbés $|\mathbf{n}_0^{1,\dots,s}\rangle$ (III.34) ; les produits scalaires (III.41a) valent alors $\langle \mathbf{n}_0^i | \varphi_{\mathbf{n}^k}^{\text{él}} \rangle = \delta_{i,k}$, grâce à la forme explicite (III.20) des « fonctions d'onde » non perturbées. La formule (III.42b) donne alors $P = \mathbf{1}_s$.

.....
 Conclusion

Le procédé de construction (III.46) du hamiltonien effectif (III.39a) est auto-cohérent, comme mentionné plus haut : il utilise les énergies exactes (dans un contour Γ) pour les retrouver (comme valeurs propres d'un hamiltonien (III.39a)). Nous avons naturellement besoin de passer à des calculs *perturbatifs* du hamiltonien (III.39a), vers lesquels nous nous tournons immédiatement — ils constituent la majeure partie de nos discussions à venir sur la méthode de la fonction de Green à deux temps.

SECTION 5 (Chapitre III)

Règles de Feynman

III/5.1

Développement perturbatif du hamiltonien effectif

Nous avons vu (section III/3) que l'on ne sait calculer que *perturbativement* la fonction de Green impliquée dans les matrices K (III.39b) et P (III.39c) du hamiltonien effectif (III.39a). Le développement de la fonction de Green à N particule en puissances de α (constante de structure fine — voir p. 88),

$$\mathcal{G}^N = \mathcal{G}_{(0)}^N + \mathcal{G}_{(1)}^N + \mathcal{G}_{(2)}^N + \dots, \quad (\text{III.48})$$

donne directement au travers des définitions (III.39b) et (III.39c) un développement des matrices

$$K = K^{(0)} + K^{(1)} + K^{(2)} + \dots \quad (\text{III.49a})$$

$$(\text{III.49b})$$

et

$$P = P^{(0)} + P^{(1)} + P^{(2)} + \dots. \quad (\text{III.49c})$$

Ces développements permettent à leur tour d'obtenir une série en puissances de α pour le hamiltonien effectif H_{eff} (III.39a) :

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{eff}}^{(0)} + H_{\text{eff}}^{(1)} + H_{\text{eff}}^{(2)} + \dots, \quad (\text{III.50})$$

où $H_{\text{eff}}^{(0)}$ contient les énergies d'électrons sans interaction entre eux (\hat{H}_S^I supprimé du hamiltonien (II.27)), $H_{\text{eff}}^{(1)}$ contient les effets à *un* photon (du développement (III.25b)), comme par exemple la self énergie (calculée dans

le chapitre VI), $H_{\text{eff}}^{(2)}$ ceux à *deux* photons comme la self énergie écrantée (cf. chapitre V), etc.

Les expressions de ces contributions successives de processus impliquant un nombre croissant de photons se calculent d'après la définition (III.39a) par remplacement des développements (III.49) des matrices K et P [ARTEMYEV *et al.* 2000] :

$$H_{\text{eff}}^{(0)} = K^{(0)} \tag{III.51a}$$

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = K^{(1)} - \frac{1}{2}\{P^{(1)}, K^{(0)}\} \tag{III.51b}$$

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = K^{(2)} - \frac{1}{2}\{P^{(1)}, K^{(1)}\} - \frac{1}{2}\{P^{(2)}, K^{(0)}\} + \frac{3}{8}\{P^{(1)2}, K^{(0)}\} + \frac{1}{4}P^{(1)}K^{(0)}P^{(1)} \tag{III.51c}$$

...

où les anticommutateurs $\{, \}$ proviennent des *deux* matrices $P^{-1/2}$ de H_{eff} (III.39a), et où nous avons remplacé la matrice P en l'absence d'interaction ($\alpha = 0$) par sa valeur $P^{(0)} = \mathbf{1}_s$ (qui se déduit de immédiatement de la définition (III.39c) et du calcul (III.36) des éléments de matrice de la fonction de Green que nous avons effectué dans le cas non perturbé.

.....
 Expression explicite du hamiltonien effectif

Afin de pouvoir calculer explicitement les contributions successives (III.51) au hamiltonien effectif (III.39a), il est nécessaire de pouvoir exprimer les éléments de matrice

$$\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \bigotimes_{\gamma^0}^N | \mathbf{n}_0^j \rangle \tag{III.52}$$

de *chaque terme perturbatif* k de la fonction de Green (III.48), car cette quantité donne accès aux matrices K (III.39b) et P (III.39c) — nous rappelons que de tels éléments de matrice entre états non perturbés de la forme simple (III.34) sont définis explicitement dans l'Eq. (III.33). Comme d'habitude en théorie des champs, le développement en perturbation (III.25b) utilisé avec le théorème de Wick se laisse interpréter en termes de diagrammes de Feynman (cf. p. 85), si bien que l'on peut écrire directement pour chaque diagramme la formule mathématique qu'il représente (et qui vaut un élément de matrice (III.52) — nécessaire à l'expression du hamiltonien effectif (III.39a)).

Règles de Feynman

III/5.2-a \diamond **Plan**

Afin de calculer les éléments de matrice (III.52) nécessaires à l'obtention du hamiltonien effectif (III.39a), il est nécessaire d'établir d'abord la liste des diagrammes de Feynman à inclure à un ordre donné, sans redondances et de manière exhaustive. Cette question n'étant à notre connaissance pas discutée dans les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps cités jusqu'ici, nous l'abordons ici.

Une fois les diagrammes énumérés, les règles de Feynman que nous présentons plus loin dans cette section permettent de les transformer en contributions mathématiques aux éléments de matrice (III.52).

III/5.2-b \diamond **Introduction**

Les règles de Feynman que nous présentons ici rendent systématique l'obtention de formules pour les *éléments de matrice* (III.52), à une restriction près : elles donnent des expressions valides uniquement pour un paramètre énergétique E réel, *i. e.* elles permettent d'obtenir les éléments de matrice (III.52) de la fonction de Green définie dans l'Eq. (III.9) et non de la fonction de Green (III.10) nécessaire au calcul du hamiltonien effectif (voir les Eqs. (III.39b) et (III.39c)). Cependant, la « *particule fantôme* » que j'introduis plus loin (section IV/3) permettra de faire un second pas et de calculer les intégrales à E complexe (III.39b) et (III.39c) à partir de la fonction de Green pour des énergies réelles (III.9).

Les règles originales remontent au moins à SHABAEV [1990a], et une version récente (incluant des règles destinée à prendre en compte le recul du noyau) peut en être trouvée dans SHABAEV [2000] ou dans SHABAEV [2002]. Elles sont cependant presque toujours définies de façon imprécise [SHABAEV 1994, 2000, 2002] (propagateurs sans sens de propagation, énergies virtuelles non précisées), si bien que nos tables III.1 et III.2 (voir plus loin) peut être utile comme référence.

Dérivation

Je donne pour référence le principe de la dérivation des règles de Feynman dans l'appendice A, dans un calcul menant à la contribution à la fonction de Green (III.9) du processus de « self énergie écrantée » suivant (interaction entre électrons modifiée par la présence de l'action d'un électron sur lui-même) :

dont nous étudierons l'influence sur les niveaux d'énergie des atomes et ions héliumoïdes (*cf.* chapitre V). Nous avons inclus l'appendice A malgré la

relative simplicité des calculs car nous ne connaissons aucune démonstration publiée de ces règles ; je les ai d'ailleurs complétées afin d'y inclure d'une part le *terme de renormalisation* en δm de (II.18a) et d'autre part le *potentiel extérieur* Φ de (II.18a) (qui peut par exemple contenir le champ magnétique du noyau, responsable de la structure hyperfine [BEIER 2000]).

Wick et
intégrations
temporelles

Les règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps forment essentiellement une version « précalculée » de deux points : (a) l'application du *théorème de Wick* sur le développement du propagateur (III.25b) et (b) le calcul de toutes les *intégrations sur les temps* (dans la définition de la fonction de Green (III.9) ainsi que sur les temps possibles d'interaction dans (III.25b)). Nous allons donc détailler successivement ces deux points, en en décrivant les conséquences pratiques dans des cas concrets.

III/5.2-c \diamond Liste des processus physiques

Nouveaux
diagrammes

Nous avons vu p. 85 que le propagateur (III.7) pouvait s'obtenir en décomposant chaque amplitude de propagation à $2k$ interactions (III.25b) en propagateurs *élémentaires* (III.26). Il en résulte un développement du propagateur en diagrammes de Feynman qui permet en principe de calculer au travers de la définition (III.9) chaque contribution (III.52) aux éléments de matrice de la *fonction de Green* utilisés dans le *hamiltonien effectif* (voir les Eqs. (III.39)). Les règles de Feynman que nous donnons plus loin permettent ainsi de calculer à l'aide de diagrammes à k photons tout élément de matrice (à l'ordre α^k) de la forme (III.33)

$$\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{(k)}^N(E \in \mathbb{R}) \bigotimes_{\gamma^0}^N | \mathbf{n}'_0 \rangle, \quad (III.54)$$

et défini sur des états propres du hamiltonien non perturbé, de la forme¹ (III.34) :

$$|\mathbf{n}_0\rangle \equiv |n_N, \dots, n_1\rangle \quad \text{et} \quad |\mathbf{n}'_0\rangle \equiv |n'_N, \dots, n'_1\rangle.$$

Les éléments de matrice (III.54) diffèrent manifestement des contributions (III.25b) au propagateur, si bien que nous avons besoin de *nouveaux diagrammes* pour les représenter — au lieu d'utiliser des diagrammes semblables à ceux de (III.29). Nous n'avons plus besoin d'indiquer que les états initial et final, et plus aucune position intermédiaire, conformément à la forme (III.54) des éléments de matrice à calculer. Nous proposons ainsi de

¹En particulier, les éléments de matrice (III.54) sont définis par (III.33) sur des états qui ne peuvent pas être des *combinaisons linéaires* d'états de Fock de la forme (III.34).

noter les contributions à (III.54) en indiquant uniquement les *états individuels des électrons « externes »*, comme par exemple dans

$$\begin{array}{ccc}
 n'_1 & \longrightarrow & n_1 \\
 & & \vdots \\
 & & \vdots \\
 n'_2 & \longrightarrow & n_2
 \end{array}
 \tag{III.55}$$

qui représente par définition l'une des contributions de l'échange de $k = 1$ photon entre $N = 2$ électrons à l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{(k=1)}^{N=2}(E) \otimes^{N=2} \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle$ nécessaire au calcul du hamiltonien effectif (III.39a) dans les héliumoïdes. Les *temps* entre lesquels se fait la propagation dans les diagrammes (III.29) sont logiquement remplacés au travers de (III.9) et de (III.33) par les électrons des états $|\mathbf{n}'_0\rangle$ et $|\mathbf{n}_0\rangle$ de l'élément de matrice qui nous intéresse (III.54); de même, plus aucun temps d'interaction n'apparaît aux points d'interaction puisqu'il n'en figure aucun dans (III.54).

L'un des intérêts de la notation (III.55) [LE BIGOT *et al.* 2001b] (pour désigner l'une des contributions aux éléments de matrice de fonction de Green (III.54)) est d'aider — grâce à l'usage de flèches sur les propagateurs et à l'écriture explicite des états attachés aux propagateurs externes — à l'*énumération des diagrammes* à prendre en compte, comme je le montre ci-après. Cependant, nous notons que les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps n'utilisent *pas* la même notation, comme par exemple dans ARTEMYEV *et al.* [1999, 1997] et SHABAEV [1993] — la notation (sans flèches) de ces auteurs oblige par exemple à lister séparément des diagrammes qui donnent des contributions mathématiquement très proches.

Liste des diagrammes

Quelle liste de diagrammes doit-on considérer pour obtenir *l'ensemble exact* des contributions à un élément de matrice (III.54)? La réponse à cette question étant à notre connaissance restée *implicite* dans tous les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps, nous discutons ici de ce point nécessaire à toute application concrète des règles de Feynman de la méthode.

Grâce aux conventions de notation (III.26) que nous avons choisies¹ la solution à ce problème de liste des diagrammes à considérer est *simple* (pour une démonstration, voir l'appendice A) : il suffit de dessiner les diagrammes *comme dans (III.55)* en cherchant toutes les possibilités de permutation des électrons « entrants » et « sortants » qui donnent des diagrammes (topologiquement) différents — aucune de celles-ci n'étant physiquement privilégiée. Par exemple, lorsque l'on emploie les règles de Feynman (voir plus loin), l'influence sur l'élément de matrice (III.54) de l'échange d'un photon entre les

¹La convention de notation que nous introduisons dans (III.55) remplace à notre avis avantageusement celle utilisée dans les articles employant la méthode de la fonction de Green à deux temps (qui sont sans flèches; voir par exemple ARTEMYEV *et al.* [1999, 1997]; SHABAEV [1993]) : elle évite d'avoir à énumérer inutilement des diagrammes semblables (*cf.* Eq. (III.59)) et est plus souple puisqu'elle n'impose pas de dessiner *toutes* les lignes d'électrons dans la même direction.

deux électrons d'un héliumoïde se résume exactement aux *deux* diagrammes

$$\begin{array}{ccc}
 n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1 & & n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2 \\
 & \text{et} & \\
 n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2 & & n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1
 \end{array} \quad (III.56)$$

qui prennent en compte l'indiscernabilité des électrons (on peut considérer que l'électron dans l'état n'_1 se transforme *soit* en n_1 , *soit* en n_2). D'autres processus contribuant à (III.54) dans les héliumoïdes donnent eux *quatre* contributions différentes, lorsque l'on prend en compte l'indiscernabilité des électrons : nous calculerons ainsi dans le chapitre IV la contribution au hamiltonien effectif (III.39a) des quatre diagrammes « de self énergie écrantée » suivants :

$$\begin{array}{ccc}
 n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1 & & n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1 \\
 & \text{et} & \\
 n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2 & & n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2
 \end{array} \quad (III.57a)$$

(qui prennent en compte l'indiscernabilité des électrons « entrants ») et

$$\begin{array}{ccc}
 n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2 & & n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_2 \\
 & \text{et} & \\
 n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1 & & n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_1
 \end{array} \quad (III.57b)$$

(qui prennent en compte l'indiscernabilité des électrons « sortants » en faisant agir la self énergie sur l'autre électron sortant, comparé à (III.57a)).

.....

Permutations Les processus d'interaction entre les électrons de l'état $|n'_0\rangle$ et ceux de l'état $|n_0\rangle$ dessinés dans les diagrammes (III.56), (III.57a) et (III.57b) ne diffèrent que par des échanges d'électrons liés à l'indiscernabilité. Nous simplifions donc la situation en regroupant les processus physiques indiscernables en *un seul* diagramme et indiquant explicitement les *permutations* utilisées : suivant [SHABAEV 1993] nous noterons les deux possibilités d'échange d'un photon par *un seul* diagramme

$$\begin{array}{ccc}
 n'_1 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_{P(1)} & & \\
 & \text{et} & \\
 n'_2 \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_{P(2)} & &
 \end{array} \quad (III.58)$$

où P permute ou non les deux électrons sortants ($P = \text{Id}$ ou $P = 1 \leftrightarrow 2$). Les quatre diagrammes (III.57a) et (III.57b) peuvent être eux aussi simplement résumés [LE BIGOT *et al.* 2001b] grâce à *deux* permutations P et P' et à *un unique diagramme* :

$$\begin{array}{ccc}
 n'_{P'(1)} \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_{P(1)} & & \\
 & \text{et} & \\
 n'_{P'(2)} \longrightarrow \bullet \longrightarrow n_{P(2)} & &
 \end{array} \quad (III.59)$$

Ces permutations ne servent pas uniquement à décrire par un seul diagramme des contributions à la matrice de Green (III.54) ne différant qu'à cause de l'introduction d'électrons individualisés : elles permettent aussi de représenter toutes ces contributions par une *unique expression mathématique* donnée par les règles de Feynman que nous présentons ci-après.

TAB. III.1 – Règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps (première partie).

Ces règles, complétées par celles de la table III.2, permettent de calculer la contribution d'un diagramme comme (III.60) aux éléments de matrice (III.33) utilisés dans le hamiltonien effectif (III.39a). Le symbole \circlearrowright représente n'importe quel sommet interne d'un graphe (par exemple un point d'interaction électromagnétique). Dans le sous-diagramme d'interaction électromagnétique, retourner la flèche du photon d'énergie q donne la même expression mathématique, au changement $q \rightarrow -q$ près. Les sommes sur les ν_i (des matrices α^{ν_i}) sont implicites. Les notations sont définies dans le texte : ε_n et ϕ_n (II.1), ε^- (III.63), G (Eqs. (III.61a) et (III.62)), H (Eqs. (III.61b) et (III.65)), e (II.2), $\alpha^\nu \equiv \gamma^0 \gamma^\nu$ (II.14), δm (II.18b).

Propagateurs externes		
$P'(a) \xrightarrow{E'_{a,i}} \circlearrowright \mathbf{y}_i$	(Électron entrant)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE'_{i,a} \phi_{n'_{P'(a)}}(\mathbf{y}_i) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(a)}}^- - E'_{i,a}}$
$\mathbf{y}_j \circlearrowright \xrightarrow{E_{j,a}} P(a)$	(Électron sortant)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE_{a,j} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(a)}}^- - E_{a,j}} \phi_{n_{P(a)}}^\dagger(\mathbf{y}_j)$
$P'(a) \xrightarrow{E'_{a,a}} P(a)$	(Électron sans interaction)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE'_{a,a} \delta_{n'_{P'(a)}, n_{P(a)}} \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(a)}}^- - E'_{a,a}}$
Propagateurs internes		
$\mathbf{y}_i \circlearrowright \xrightarrow{z_{i,j}} \circlearrowright \mathbf{y}_j$	(Électron interne)	$\frac{1}{2\pi i} \int dz_{i,j} G(\mathbf{y}_j, \mathbf{y}_i; z_{i,j})$
$\mathbf{y}_i \circlearrowright \xrightarrow{q_{i,j}} \circlearrowright \mathbf{y}_j$	(Photon)	$\frac{1}{2\pi i} \int dq_{i,j} H_{\nu_j \nu_i}(\mathbf{y}_j, \mathbf{y}_i; q_{i,j})$

III/5.2-d \diamond Tables des règles de Feynman

Les tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108) contiennent toutes les règles de Feynman que j'ai redérivées (ou dérivées). Elles donnent les éléments de matrice (III.54) — qui mènent au hamiltonien effectif (III.39a) de la méthode de la fonction de Green à deux temps — pour des énergies E réelles (seulement). Nous précisons ci-dessous les conventions à suivre afin d'utiliser ces règles. Nous donnons dans l'appendice A les *principes* qui permettent de dériver toutes les règles de Feynman présentées dans les table III.1 et III.2.

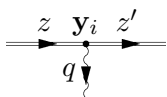
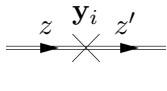
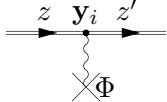
Diagrammes
pour les
règles

Les règles de Feynman de la table III.1 doivent être appliquées à un *type particulier de diagramme*, que nous allons illustrer par un exemple.

Comme indiqué p. 105, les règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps contiennent en particulier le calcul des intégrales

TAB. III.2 – Règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps (seconde partie).

Ces règles de Feynman complètent celles de la table III.1

Points d'interaction		
	(Interaction électroma- gnétique)	$-(2\pi i) e \alpha^{\nu_i} \underbrace{\delta(z - z' - q)}_{\text{Conservation d'énergie}} \int d^3 \mathbf{y}_i$
	(Contre- terme de masse)	$-(2\pi i) \delta m \beta \underbrace{\delta(z - z')}_{\text{Conservation d'énergie}} \int d^3 \mathbf{y}_i$
	(4-potentiel électroma- gnétique)	$-(2\pi i) e \alpha^{\nu_i} \underbrace{\delta(z - z')}_{\text{Conservation d'énergie}} \int d^3 \mathbf{y}_i \Phi_{\nu_i}(\mathbf{y}_i)$
Ensemble du diagramme		
$E \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} P'(1) \xrightarrow{E'_{1,i}} \\ P'(2) \xrightarrow{E'_{2,j}} \\ \dots \\ P'(N) \xrightarrow{E'_{N,k}} \end{array} \right.$	(Ensemble des électrons entrants)	$-(2\pi i) \underbrace{\delta(E - E'_{1,i} - E'_{2,j} - \dots)}_{\text{Conservation d'énergie}}$

- Facteur global : signature de la permutation PP' .
- Pour chaque boucle de particules de Dirac : $(-1)\text{Tr}(\dots)$.

sur un *temps* de propagation, qui est remplacé par transformée de Fourier (III.9) en une *énergie* E . De façon naturelle (voir l'appendice A) — et habituelle [PESKIN and SCHROEDER 1995] — chaque propagateur élémentaire se voit alors attribuer par les règles de Feynman une *énergie* (« virtuelle »).

Afin d'appliquer ces règles, il est donc nécessaire de *compléter* les diagrammes utilisés pour noter chaque contribution à un élément de matrice (III.54), en associant une énergie virtuelle à *chaque propagation élémentaire* : par exemple, la contribution à (III.54) de la self énergie écrantée (III.59) s'obtient en appliquant les règles de Feynman à :

$$(III.60)$$

Plusieurs détails apparaissent sur un tel graphe, par rapport aux graphes utilisés pour énumérer les contributions (III.54) à la fonction de Green (comme (III.55) et (III.59)). D'une part, des *flèches introduites sur les propagateurs photoniques* donnent le *signe conventionnel* des énergies virtuelles qui les parcourent (le sens de ces flèches est arbitraire), ce qui permet d'appliquer aisément les conservations d'énergie aux points d'interaction. D'autre part, seules les positions \mathbf{y}_i dans l'espace des points d'interaction subsistent, par rapport au développement du propagateur, puisque les temps d'interaction du propagateur (*cf.* (III.29) et (III.25b)) ont été remplacés par des énergies virtuelles (appendice A).¹

Enfin, obtenir un *signe correct* pour l'élément de matrice (III.33) à partir des règles de Feynman des tables III.1 et III.2 demande d'*apparier d'une façon particulière* les électrons de chaque ligne des diagrammes. Ainsi, dans le diagramme (III.60), l'électron entrant $P'(1)$ se « transforme » finalement en l'électron sortant $P(1)$; de même l'électron $P'(2)$ est sur la ligne de l'électron $P(2)$ (et ainsi de suite pour des diagrammes possédant plus de deux électrons externes). Une telle règle est nécessaire afin de prendre en compte l'ordre particulier dans lequel apparaissent les champs quantiques du propagateur (III.25a) utilisé dans la définition de la fonction de Green (III.9) et ses éléments de matrice (III.33) — en effet le théorème de Wick associe à chaque appariement possible du développement (III.25b) un *signe* lié aux permutations des champs quantiques contractés en propagateurs élémentaires (III.26) [WICK 1950]. Cette consigne de notation des électrons

¹On peut aussi noter que nous avons numéroté individuellement chacun des quatre points d'interaction et imposé en conséquence les indices des énergies « entrantes » E' , « sortantes » E et intermédiaires z pour les électrons et q pour les photons. La structure de l'interaction (II.18b) permet de n'avoir jamais deux énergies différentes notées de la même façon par notre convention.

entrants et sortants sur le diagramme qui sert de base à l'application des règles des tables III.1 et III.2 s'applique aussi quand, pour des raisons de symétrie, l'une ou l'autre des permutations P et P' est l'identité, comme dans le diagramme (III.58). Derrière cette règle se trouve le caractère fermionique des électrons et le signe négatif apporté par la permutation de deux états.

Conservations
d'énergie

Comme on peut le voir dans la table III.2 des règles de Feynman, ces énergies virtuelles sont *conservées* aux sommets. Ceci rend les calculs plus aisés qu'avec la méthode de Gell-Mann et Low, où ces conservations d'énergies ne sont qu'*approximatives* [MOHR 1985, 1989 ; BLUNDELL *et al.* 1993] à cause de l'interaction entre photons et électrons, que l'on branche adiabatiquement — ceci entraînant la perte des conservations d'énergie offertes par un hamiltonien indépendant du temps.

Interprétation de
l'énergie E

D'autre part, les règles de Feynman de la table III.2 fournissent une *interprétation du paramètre E* de la fonction de Green (III.9) (lorsque celui-ci est *réel*) : l'énergie E est l'énergie totale que se répartissent les particules virtuelles (voir la règle pour l'« ensemble du diagramme »).

Enfin, les règles de Feynman montrent explicitement la distinction qu'il est nécessaire de faire entre la fonction de Green d'abord définie pour des énergies *réelles* (III.9) puis *complexes* (III.10) : la présence d'une fonction δ de Dirac impliquant l'énergie E impose que celle-ci soit réelle. Nous verrons dans le chapitre IV la méthode que nous proposons pour que malgré tout le hamiltonien effectif (voir les Eqs. (III.39)) — qui nécessite de connaître la fonction de Green pour des énergies complexes — puisse être calculé à partir des expressions fournies par les règles de Feynman.

Propagateurs
élémentaires

Les règles de Feynman de la table III.1 font naturellement usage de propagateurs élémentaires (III.26), qui décrivent des particules ne subissant pas l'interaction électromagnétique. Ainsi, afin d'utiliser des notations depuis longtemps établies [MOHR 1974b ; INDELICATO and MOHR 1998b], nous faisons usage des propagateurs (en représentation de Fourier) suivants, définis à partir de ceux en temps (III.26) : pour les électrons

$$G_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) \equiv i \int d\Delta t e^{iE\Delta t} S_F(\mathbf{x}, \alpha, \Delta t; \mathbf{x}', \alpha', t' = 0) \gamma^0 \quad (\text{III.61a})$$

où G est une matrice 4×4 représentant la propagation des bi-spineurs de Dirac à quatre composantes, dont les éléments sont ici explicitement désignés par leur position (α, α') ; le propagateur électronique « libre » S_F est défini dans (III.26a). De la même manière, les règles de Feynman de la table III.1 représentent la propagation élémentaire de photons entre deux points par le propagateur suivant :

$$H_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; q) \equiv i \int d\Delta t e^{iq\Delta t} D_{\mu\nu}((\Delta t, \mathbf{x}); (t' = 0, \mathbf{x}')), \quad (\text{III.61b})$$

défini à partir du propagateur photonique libre (III.26b).

Lors de *calculs numériques* [BROWN *et al.* 1959 ; MOHR 1974a] du hamiltonien effectif (III.39a), il est nécessaire de disposer de formules analytiques pour les *propagateurs élémentaires* (III.61).

Le propagateur de Dirac (III.61a) est le plus compliqué, à cause du potentiel V dans lequel se meuvent les électrons (voir les Eqs. (III.26a), (II.9), (II.17) et (II.1)). De manière formelle, la fonction de Green (III.61a) peut toujours se développer dans la base des états propres de Dirac¹ [MOHR *et al.* 1998] :

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{x})\phi_n^\dagger(\mathbf{x}')}{\varepsilon_n^- - E} \quad (\text{III.62})$$

où la somme se fait sur tous les états propres de l'équation de Dirac (II.1) et où nous avons introduit une notation condensée — que nous utiliserons beaucoup — pour les énergies ε tournées d'un angle négatif infinitésimal :

$$\varepsilon^- \equiv \varepsilon(1 - i0) ; \quad (\text{III.63})$$

les coordonnées (α, α') des éléments de la matrice 4×4 G sont rendues inutiles par l'usage des matrices 4×4 $\phi_n(\mathbf{x})\phi_n^\dagger(\mathbf{x}')$. Dans le cas d'électrons dans un potentiel *coulombien*, on en connaît une décomposition en ondes partielles [WICHMANN and KROLL 1956 ; BRAUN and SCHAEFER 1956 ; HYLTON 1984 ; INDELICATO and MOHR 1995], que nous avons utilisée dans les calculs numériques présentés dans le chapitre VI [LE BIGOT *et al.* 2001a]. Il est aussi possible d'approximer le propagateur (III.62) en utilisant une approximation par *bases finies* de fonctions dont la somme donne le propagateur exact (voir par exemple HYLTON and SNYDERMAN [1997] et les références qu'il contient).

Le propagateur *photonique* (III.61b) est quant à lui construit à partir d'ondes électromagnétiques dans le vide et est bien connu (COHEN-TANNOUJI *et al.* [1987] ; KAKU [1993] ; ITZYKSON and ZUBER [1980, § 3-2-2]) ; par exemple, en jauge de Feynman et avec un tenseur métrique $g \equiv \text{diag}(1, -1, -1, -1)$, le propagateur élémentaire (III.26b) vaut² [ITZYKSON and ZUBER 1980]

$$D_{\mu\nu}(x; y) = g_{\mu\nu} \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4k \frac{e^{-ik(x-y)}}{k^2 - \mu^2 + i0},$$

qui donne facilement par le théorème des résidus la fonction de Green du photon (III.61b) sous une forme similaire, vis-à-vis de l'énergie q , à celle de

¹La décomposition spectrale qui suit est le cas particulier à $N = 1$ particule de la fonction de Green en énergie calculée à l'ordre zéro (III.19).

²Nous rappelons que μ est la masse infinitésimale donnée artificiellement aux photons pour isoler les niveaux atomiques sans photons des niveaux atomiques avec photons (*cf.* section III/2.4).

la fonction de Green de Dirac (III.62) :

$$H_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; q) = g_{\mu\nu} \frac{-1}{(2\pi)^3} \sum_{\epsilon=\pm 1} \int d^3\mathbf{k} \frac{\epsilon}{2\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}}{(\epsilon\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2})^- - q}. \quad (\text{III.64})$$

Cette expression, qui fait apparaître explicitement les singularités du propagateur H dans le plan complexe de l'énergie virtuelle q , est utile pour étudier les propriétés analytiques des diagrammes (*cf.* section IV/3.3-b). Une forme plus concise [SHABAEV and FOKEEVA 1994 ; MOHR 1989] de la fonction de Green des photons peut être obtenue à partir de (III.64) par intégration :

$$H_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; q) = -\frac{e^{-b(q)r}}{4\pi r} g_{\mu\nu}, \quad (\text{III.65})$$

où $r \equiv \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$, $b(q) \equiv -i\sqrt{q^2 - \mu^2 + i0}$ (et $\text{Re}(b) > 0$ pour la convergence en $r \rightarrow \infty$). Cette forme simple nous sera utile dans le chapitre sur la self énergie (chapitre VI).

III/5.2-e \diamond Exemple : la self énergie écrantée

Afin d'illustrer l'usage des règles de Feynman, prenons l'exemple de la *self énergie écrantée* (III.59) — pour laquelle nous évaluerons à terme la contribution au hamiltonien effectif (*cf.* chapitre IV). Le plus simple est de construire *progressivement* la contribution de ce diagramme à l'élément de matrice (III.54) (d'ordre $k = 2$). Comme indiqué p. 110, la première étape consiste à étiqueter le diagramme par les coordonnées (spatiales) des points d'interaction et par les énergies virtuelles qui passent dans chaque propagateur — en plus des états électroniques individuels de l'élément de matrice (III.33) déjà notés sur les propagateurs externes du diagramme (III.59) ; nous appliquons ainsi les règles de Feynman des tables III.1 et III.2 au diagramme (III.60).

Les différents facteurs donnés par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) pour un certain diagramme doivent être *ordonnés* correctement afin de produire l'expression mathématique de sa contribution aux éléments de matrice (III.33). Dans les cas des règles de la méthode de la fonction de Green à deux temps, nous allons suivre une démarche générale dont la première étape est la suivante : nous allons *suivre* la propagation de chaque électron sur les diagrammes à flèches que nous avons introduits p. 110, en multipliant successivement (sur la gauche) les différents facteurs donnés dans les règles des tables III.1 et III.2.

Par exemple, grâce aux règles de Feynman (*cf.* p. 108) et aux notations introduites dans le diagramme (III.60), la contribution de la *ligne supérieure* de (III.60) (où l'électron $n'_{P'(1)}$ se transforme en l'électron $n_{P(1)}$ avec une

certaine amplitude de probabilité) vaut

$$\begin{aligned}
 & \int dE'_{11} dz_{12} dz_{23} dE_{31} \int d^3\mathbf{y}_1 d^3\mathbf{y}_2 d^3\mathbf{y}_3 \\
 & \left(\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}}^- - E_{31}} \phi_{n_{P(1)}}^\dagger(\mathbf{y}_3) \right) [-(2\pi i)e\alpha^{\nu_3} \delta(z_{23} - E_{31} - (-q_{23}))] \\
 & \quad \times \left(\frac{1}{2\pi i} G(\mathbf{y}_3; \mathbf{y}_2; z_{23}) \right) [-(2\pi i)e\alpha^{\nu_2} \delta(z_{12} - z_{23} - q_{23})] \\
 & \quad \times \left(\frac{1}{2\pi i} G(\mathbf{y}_2; \mathbf{y}_1; z_{12}) \right) [-(2\pi i)e\alpha^{\nu_1} \delta(E'_{11} - z_{12} - q_{14})] \\
 & \quad \times \left(\frac{1}{2\pi i} \phi_{n'_{P'(1)}}(\mathbf{y}_1) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- - E'_{11}} \right) \quad (\text{III.66a})
 \end{aligned}$$

où nous avons inclus la contribution des points d'interaction, qui montrent clairement les conservations d'énergie grâce à des fonctions delta de Dirac.

Notons d'autre part que faire le lien entre l'expression (III.66a) et le diagramme (III.60) demande de lire (III.66a) *de la droite vers la gauche* ; ainsi l'électron « entrant » $n'_{P'(1)}$ du diagramme (III.60) est à *droite* de l'expression (III.66a). Ceci correspond à l'ordre conventionnel utilisé dans le propagateur (III.26a) d'un électron : un électron se propageant de (ξ', t') à (ξ, t) possède une amplitude que l'on note $S_F(\xi, t; \xi', t')$, comme indiqué dans (III.26a) — avec le point de départ en *second argument*.

La ligne *inférieure* du diagramme (III.60) donne à l'élément de matrice (III.54) une contribution qui s'obtient de la même façon grâce aux règles de Feynman des tables III.1 et III.2, et qui vaut

$$\begin{aligned}
 & \int dE'_{24} dE_{42} \int d^3\mathbf{y}_4 \left(\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}}^- - E_{42}} \phi_{n_{P(2)}}^\dagger(\mathbf{y}_4) \right) \quad (\text{III.66b}) \\
 & \quad \times [-(2\pi i)e\alpha^{\nu_4} \delta(E'_{24} + q_{14} - E_{42})] \left(\frac{1}{2\pi i} \phi_{n'_{P'(2)}}(\mathbf{y}_4) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(2)}}^- - E'_{24}} \right).
 \end{aligned}$$

On voit sur cette contribution l'importance des flèches sur les propagateurs photoniques, que nous avons ajoutées dans (III.60) au diagramme (III.59) : ces flèches conditionnent les signes des énergies contenues dans les fonction delta de Dirac (qui donnent les conservations d'énergie aux points d'interaction).

Après les contributions (III.66a) et (III.66b) des deux lignes d'électrons du diagramme (III.60), il reste à inclure la contribution des *photons* ; d'après les règles de Feynman (*cf.* p. 108), on obtient comme contribution de ces photons à (III.54)

$$\int dq_{14} dq_{23} \left(\frac{1}{2\pi i} H_{\nu_4\nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; q_{14}) \right) \left(\frac{1}{2\pi i} H_{\nu_3\nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; q_{23}) \right) ; \quad (\text{III.66c})$$

par définition, les intégrales de cette formule s'appliquent à l'ensemble de l'expression mathématique déduite des règles de Feynman, et pas seulement aux propagateurs photoniques de (III.66c).

Enfin, il ne reste plus qu'à prendre en compte les règles pour l'« ensemble du diagramme » contenues dans la table III.2, p. 109. Ces règles indiquent que le paramètre E de la fonction de Green (III.9) représente l'énergie virtuelle totale qui traverse tout diagramme (du type de (III.60)); elles prennent aussi en compte les permutations possibles des électrons. Ces règles globales donnent ainsi une contribution

$$-(2\pi i)\delta(E - E'_{11} - E'_{24})(-1)^{PP'}, \quad (\text{III.66d})$$

où

$$(-1)^{PP'} \equiv \text{signature de la permutation } PP'. \quad (\text{III.67})$$

La contribution du diagramme (III.59) à l'élément de matrice (III.54) est simplement, par définition, le regroupement des contributions des lignes électroniques (III.66a) et (III.66b), des propagateurs photoniques (III.66c) et des règles globales (III.66d) — en prenant soin de mettre toutes les intégrations à gauche de l'expression finale. On obtient ainsi grâce aux formules (III.66) la contribution de la self énergie écrantée (III.59) à l'élément de matrice (III.33), que nous donnons ici pour référence :

$$\begin{aligned} \langle n_0 | \mathcal{G}_{P' \overline{12} P}(E \in \mathbb{R}) \bigotimes^2 \gamma^0 | n'_0 \rangle \equiv & \\ & \int dE'_{11} dz_{12} dz_{23} dE_{31} dE'_{24} dE_{42} dq_{14} dq_{23} \int d^3\mathbf{y}_1 d^3\mathbf{y}_2 d^3\mathbf{y}_3 d^3\mathbf{y}_4 \\ & \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 [-(2\pi i)]^5 e^4 (-1)^{PP'} \\ & \times \delta(z_{23} - E_{31} - (-q_{23})) \delta(z_{12} - z_{23} - q_{23}) \delta(E'_{11} - z_{12} - q_{14}) \\ & \times \delta(E'_{24} + q_{14} - E_{42}) \delta(E - E'_{11} - E'_{24}) \\ & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}}^- - E_{31}} \phi_{n_{P(1)}}^\dagger(\mathbf{y}_3) \alpha^{\nu_3} G(\mathbf{y}_3; \mathbf{y}_2; z_{23}) \alpha^{\nu_2} \right. \\ & \quad \left. \times G(\mathbf{y}_2; \mathbf{y}_1; z_{12}) \alpha^{\nu_1} \phi_{n'_{P'(1)}}(\mathbf{y}_1) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- - E'_{11}} \right) \\ & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}}^- - E_{42}} \phi_{n_{P(2)}}^\dagger(\mathbf{y}_4) \alpha^{\nu_4} \phi_{n'_{P'(2)}}(\mathbf{y}_4) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(2)}}^- - E'_{24}} \right) \\ & \times [H_{\nu_4\nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; q_{14}) H_{\nu_3\nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; q_{23})] \end{aligned} \quad (\text{III.68})$$

(Une dérivation de ce résultat à partir du théorème de Wick appliqué au développement du propagateur (III.25b) se trouve dans l'appendice A.) Cette contribution aux éléments de matrice (III.33) rentre dans les

intégrandes des matrices K (III.39b) et P (III.39c) qui permettent de calculer le hamiltonien effectif (III.39a) — l'intégration sur le contour Γ contenue dans ces équations n'est pas évidente, d'après la forme (III.68), et nous consacrons le chapitre suivant à des méthodes permettant de systématiquement gérer cette difficulté très générale.

Pour écrire la contribution de tout autre diagramme que (III.59) aux éléments de matrice (III.33), on peut procéder de manière similaire à l'exemple que nous venons de traiter — à ceci près que si une ligne de propagateurs électroniques se referme sur elle-même en une *boucle*, les règles de la table III.2 demandent d'appliquer l'opérateur de trace à l'ensemble de l'expression mathématique correspondant à cette boucle, comme en QED (voir par exemple [PESKIN and SCHROEDER 1995]).

SECTION 6 (Chapitre III)

Conclusion : des difficultés subsistent

Résumé

Nous avons présenté dans ce chapitre les bases d'une méthode pour l'obtention des niveaux atomiques prédits par le hamiltonien (II.27) de l'électrodynamique quantique des états liés. Cette méthode « de la fonction de Green à deux temps » a été introduite relativement récemment par Shabaev [SHABAEV 1988b, 1990a,b] et nous avons tenté de la présenter sous une forme plus détaillée que dans les articles la décrivant mentionnés dans ce manuscrit. Elle présente l'avantage de donner les niveaux atomiques y compris lorsque ceux-ci sont quasi-dégénérés¹ — ce qui est un grand avantage par rapport à la procédure de Gell-Mann–Low–Sucher (*cf.* section II/2.1), partagé seulement par la méthode de Lindgren (*cf.* section II/2.2).

En résumé, la fonction de Green à N particules (III.10) fait apparaître les énergies des états atomiques à $\pm N$ charges élémentaires comme des *pôles* d'une fonction méromorphe (III.17) — après ajout d'une masse infinitésimale aux photons. On peut en principe en obtenir les positions exactes (III.24). Les calculs concrets de la fonction de Green s'effectuent cependant par un développement en diagrammes de Feynman (comme (III.60)) contenant un nombre croissant de photons virtuels — développement fondé sur celui donné par le théorème de Wick pour le propagateur à N particules (III.25b). La nature perturbative d'un tel calcul impose en général d'obtenir *simultanément* les corrections de l'électrodynamique quantique à *plusieurs* niveaux d'énergie (obtenus en première approximation par simple sommation des énergies de Dirac (II.12)) — *cf.* section III/4.2. La méthode

¹Avec les notations que nous avons introduites dans la section III/4.2-a, la situation de quasi-dégénérescence est celle où des états propres $|n_0^1, \dots, n_s\rangle$ de \hat{H}_0 (II.12) subissent par ajout de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) des déplacements qui sont de l'ordre (ou plus grands) que les écarts qui les séparent — dans ce cas, un calcul perturbatif de leurs énergies exactes E_{n_1, \dots, n_s} demande de les évaluer *toutes en même temps* (*cf.* section III/4.2).

de la fonction de Green à deux temps permet de construire un *hamiltonien effectif* (III.39a) calculé perturbativement, et qui résout cette question en donnant par ses valeurs propres *plusieurs* niveaux atomiques. J'ai montré comment établir la *liste des diagrammes* permettant d'obtenir la fonction de Green avec laquelle est construit ce hamiltonien (*cf.* section III/5); cette fonction de Green peut être obtenue pour un paramètre E réel grâce aux *règles de Feynman* spécifiques à la méthode (*cf.* p. 108).

Points à compléter

Les publications sur la méthode de la fonction de Green à deux temps s'arrêtent essentiellement aux données que nous venons de présenter. Cependant, la méthode telle qu'elle est publiée est *incomplète*. D'une part, en effet, la définition du hamiltonien effectif (III.39a) demande d'entourer les énergies exactes *inconnues* par un contour Γ , afin d'en extraire les positions — en d'autres termes, la construction du hamiltonien effectif (III.39a) est *auto-cohérente* et n'a pas conduit à une procédure effective de calcul des énergies atomiques. D'autre part, la construction du hamiltonien effectif (III.39a) à l'aide des matrices K (III.39b) et P (III.39c) demande de connaître la fonction de Green pour des énergies *complexes* (III.10), alors que les règles de Feynman des tables III.1 et III.2 ne donnent la fonction de Green que pour des énergies réelles (III.9).

La solution au second problème étant liée à celle du premier, nous consacrons le chapitre suivant à ces deux points, en complétant (dans le chapitre IV) les discussions théoriques par un calcul concret de contributions au hamiltonien effectif (III.39a). Grâce aux compléments à la méthode de la fonction de Green que j'introduis dans le chapitre IV, il devient possible d'effectuer les intégrations (III.39b) et (III.39c) qui définissent le hamiltonien effectif — de façon *systematique* et sans connaître le contour Γ qui entoure les énergies exactes.

III/6. Conclusion : des difficultés subsistent

CHAPITRE IV

Méthode de la particule fantôme

Sommaire

IV/1	Introduction	120
IV/1.1	Présentation	120
IV/1.2	Notations	121
IV/2	Calcul perturbatif de fonctions singulières	122
IV/2.1	Perturbations et contours	122
IV/2.2	Résultats obtenus	125
IV/2.2-a	Pôles et perturbations	125
IV/2.2-b	Intégrales de contour et perturbations	127
IV/2.3	Application à la fonction de Green à deux temps	128
IV/2.4	Conclusion	130
IV/3	Méthode de la particule fantôme	131
IV/3.1	Introduction	131
IV/3.2	Principe de la méthode	131
IV/3.3	Résultats fondamentaux	133
IV/3.3-a	Exemple de la self énergie écrantée	133
IV/3.3-b	Détermination des pôles	134
IV/3.3-c	Extraction des pôles	140
IV/3.3-d	Représentation graphique des calculs	146
IV/3.3-e	Propriétés analytiques et particule fantôme	150
IV/4	Conclusion	155

Introduction

Présentation

Calculs systématiques et particule fantôme

Les principes ne sont pas tout : comment calculer *effectivement* les intégrales de contour (III.39b) et (III.39c) qui donnent accès aux énergies atomiques ? Afin de rendre la méthode de la fonction de Green à deux temps facilement utilisable pour obtenir la contribution de n'importe quel diagramme de Feynman au hamiltonien effectif (III.39a), je propose dans la section IV/3 une *méthode systématique* de calcul des intégrales de contour mises en jeu dans le calcul du hamiltonien effectif (III.39a). Les articles publiés proposent en effet un tel calcul pour différentes contributions, mais toujours de façon *ad hoc* (voir par exemple SHABAEV and FOKEEVA [1994] ; YEROKHIN and SHABAEV [1996b] ; YEROKHIN *et al.* [1999a]). Les stratégies de calcul que je donne dans ce chapitre tirent profit des *propriétés analytiques* des quantités manipulées, propriétés qui ne sont pas données dans les articles sus-mentionnés, malgré leur importance théorique et pratique.

Les expressions formelles obtenues par ma méthode — et qui donnent la contribution de n'importe quel diagramme au hamiltonien effectif H_{eff} (III.39a) — se laissent interpréter *graphiquement*, à condition d'introduire une « *particule fantôme* » qui remplace parfois l'électron dans les diagrammes de Feynman. La simplicité de la propagation de cette particule (qui disparaît en un temps infiniment court) est la clé de la relative aisance de son application au calcul systématique des intégrales de contour nécessaires à l'évaluation du hamiltonien effectif (III.39a).

La méthode de la fonction de Green à deux temps, combinée à nos techniques diagrammatiques, fournit un outil puissant pour la dérivation d'un hamiltonien effectif à partir de QED — hamiltonien qui donne la contribution de QED aux niveaux atomiques, y compris ceux qui sont très proches (quasi-dégénérés) par rapport à la correction de QED [LE BIGOT *et al.* 2001b].

Problèmes à résoudre

Dans ce chapitre, je résous d'autre part les problèmes laissés en suspens par la présentation des bases de la méthode de la fonction de Green à deux temps (*cf.* section III/6) : d'une part les principes de la méthode de la fonction de Green à deux temps reposent sur des calculs *non perturbatifs* et auto-cohérents — *cf.* (III.9), (III.5), (III.17) et (III.39) — où le paramètre E de la fonction de Green est utilisé dans des intégrales dans le plan complexe (III.39b) et (III.39c), le long d'un contour (multiple) Γ *inconnu* — car entourant les énergies exactes (voir p. 95) ; d'autre part, le calcul *perturbatif* de la fonction de Green grâce aux règles de Feynman (*cf.* p. 108) ne donne

que des contributions valables pour une énergie E réelle (rappelons qu'elles contiennent en particulier des fonctions δ de Dirac), alors qu'il est nécessaire de les intégrer dans le plan *complexe*. Comment évaluer *perturbativement* le hamiltonien effectif (III.39a) dans ces conditions ?

Plan du
chapitre

Je réponds dans la section IV/2 au problème du contour Γ inconnu, en montrant que les développements perturbatifs de K (III.49a) et de P (III.49c) s'obtiennent grâce à une intégrale non pas sur Γ — comme dans (III.39b) et (III.39c) —, mais sur un *autre* contour. Pour parvenir à ce résultat, j'étudie de manière *générale* les singularités qui apparaissent dans les termes perturbatif d'une fonction possédant des pôles (simples) dont la position dépend d'un paramètre (*cf.* appendice B).

Afin d'effectuer explicitement les intégrations de contour nécessaires à l'obtention du hamiltonien effectif (III.39a), je détaille dans la section IV/3 la méthode de la particule fantôme, qui permet d'obtenir *graphiquement* la *structure analytique* des éléments de matrice (III.52) qu'il est nécessaire d'intégrer — *cf.* (III.39b) et (III.39c).

Pour illustrer ces résultats, je les applique dans le chapitre V à des calculs concrets de hamiltonien effectif. Nous verrons que la méthode de la fonction de Green à deux temps est d'une pratique plus simple que les développements théoriques qui la fondent — voir le chapitre III et les sections IV/2 et IV/3.

IV/1.2 Notations

Nous nous plaçons dans ce chapitre dans le même cadre de notations que pour la présentation du hamiltonien effectif (section III/4.2-a).

Nous cherchons donc à déterminer les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}$ de s états propres $|\mathbf{n}^1, \dots, s\rangle$ du hamiltonien \hat{H} (II.27). Ces états propres sont issus — par branchement de l'interaction \hat{H}_S^1 (II.26) — du sous-espace de Fock constitué des états non perturbés $|\mathbf{n}_0^1, \dots, s\rangle$, états propres de \hat{H}_0 (II.12), d'énergies $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}^{(0)}$.

Dans la construction du hamiltonien effectif, nous avons besoin d'encercler les énergies exactes $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}$ par un contour Γ (*cf.* p. 95 et figure III.7), que nous utiliserons encore dans ce chapitre. Nous introduisons un autre contour, Γ_0 , qui est l'équivalent de Γ pour les énergies *non perturbées* $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}^{(0)}$, qu'il entoure donc une fois dans le sens positif (*cf.* figure IV.3, p. 129).

Calcul perturbatif de fonctions singulières

Perturbations et contours

La question du contour Γ qui sert à définir le hamiltonien effectif (III.39a) est relativement floue dans les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps cités jusqu'ici. Il existe d'ailleurs des variations sur le thème de l'extraction d'énergies propres à partir d'une fonction possédant des pôles simples : KATO [1949], MESSIAH [1964] et LEPAGE [1977] proposent, dans des contextes similaires à celui de la méthode de la fonction de Green à deux temps, d'autres contours que le Γ défini p. 95. Aucun de ces contours n'est parfaitement adapté à l'extraction de niveaux atomiques par la méthode de la fonction de Green à deux temps, pour des raisons fondamentales d'ordre théorique et pratique.

Masse du
photon

KATO [1949] et MESSIAH [1964] se placent dans le cadre d'une théorie des perturbations dont le but est d'obtenir les valeurs propres d'un certain hamiltonien H_α par l'usage de sa résolvante¹ $E \mapsto (E - H_\alpha)^{-1}$. Ils utilisent un contour *unique*, qui contient *par hypothèse* l'énergie *exacte* E_α comme *seule* singularité, pour *toute* valeur du paramètre perturbatif α (cf. figure IV.1(a)) — ce qui leur permet de donner des formules perturbatives pour les énergies des états étudiés. Cette hypothèse n'est *pas vérifiée* lorsque l'on utilise à la place de la résolvante la fonction de Green (III.10). En effet, comme nous l'avons vu dans la section III/2.3, toute énergie atomique est approchée à une distance $\approx \mu c^2$ par une *coupure* créée par les états propres de \hat{H} (II.27) qui contiennent un photon (de masse μ) : ceci oblige dans un premier temps à imposer à la masse μ d'être *suffisamment grande* pour ne pas faire rentrer le point de branchement de la coupure dans le contour de KATO [1949] et MESSIAH [1964] (cf. figure IV.1(a,b) et SHABAEV and FOKEEVA [1994]). Dans la même veine, pour le calcul du hamiltonien effectif (cf. section III/4.2), SHABAEV [1993] propose dans un premier temps d'entourer l'ensemble des énergies quasi-dégénérées auxquelles on s'intéresse par un contour d'une largeur qui est la masse minimale que l'on peut donner aux photons (cf. figure IV.1(c)). De tels contours (figure IV.1(a-c)) ne conviennent donc pas immédiatement à la méthode de la fonction de Green à deux temps puisqu'il est nécessaire de prendre la limite $\mu \rightarrow 0$ pour retrouver les photons de QED, ce qui empêche d'en borner la masse

¹Cette approche diffère donc de la méthode de la fonction de Green à deux temps (III.9), qui étudie les singularités d'un *produit d'opérateurs* ; cependant, dans KATO [1949] et MESSIAH [1964], la procédure d'obtention des énergies propres par intégrales de contour est similaire à (III.39).

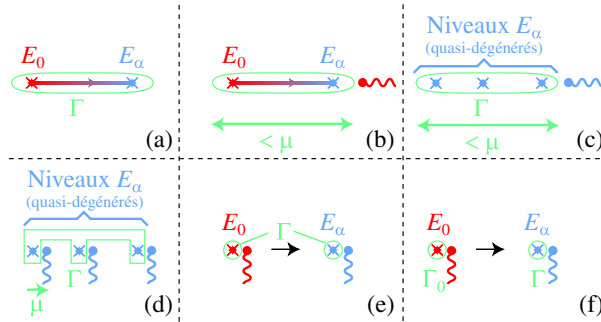


FIG. IV.1 – *Différents types de contours*. Nous avons représenté les contours d'intégration Γ que l'on trouve dans plusieurs méthodes d'obtention des énergies exactes E_α de niveaux atomiques — et qui se fondent sur l'étude des propriétés analytiques d'une fonction méromorphe (résolvante, *etc.*). L'emploi de *deux* contours Γ et Γ_0 *différents* — *cf.* dessin (f) — résout nombre des difficultés associées aux autres possibilités illustrées ici — dessins (a)–(e) — et discutées dans la section IV/2. Je montre dans la section IV/2 que le contour Γ_0 de (f), qui entoure les énergies non perturbées E_0 étudiées, doit être utilisé pour calculer *perturbativement* les énergies exactes E_α , et que le contour Γ de (f), qui encercle les énergies exactes E_α , sert à effectuer des raisonnements théoriques *non perturbatifs* — comme par exemple ceux qui conduisent au hamiltonien effectif (III.39a).

par le bas.

SHABAEV [1993] propose pour résoudre ce problème de calculer théoriquement le hamiltonien effectif (III.39a) avec une « grande » masse μ , puis de considérer les formules obtenues comme valides pour $\mu \rightarrow 0$, par prolongement analytique ; dans un raisonnement *non perturbatif* comme celui de la construction du hamiltonien effectif présentée dans SHABAEV [1993] et dans la section III/4.2-b, ce prolongement analytique de H_{eff} (III.39a) autour de $\mu = 0$ peut se justifier par une définition de H_{eff} grâce à un contour qui encerre de très près les énergies *exactes* (*cf.* figure IV.1(d) et SHABAEV [1993]) et qui permet donc aux coupures de s'en approcher ($\mu \rightarrow 0$) tout en restant *hors* du contour Γ — *cf.* figure IV.1(d). Les pôles de la fonction de Green (III.17) aux énergies exactes sont donc les seules singularités qu'elle possède à l'intérieur du contour Γ , et l'on peut construire le hamiltonien effectif comme dans SHABAEV [1993].

Singularités
et perturba-
tions

Mais ce meilleur contour « déformé » (figure IV.1(d)) conviendrait *uniquement* à un calcul *non perturbatif* du hamiltonien effectif (*cf.* SHABAEV [1993] et la section III/4.2-b). En effet, une constante des calculs *perturba-*

*tifs*¹ par une méthode du type de celle de KATO [1949] est qu'ils ne font apparaître à chaque ordre perturbatif que des fonctions possédant des pôles aux énergies *non perturbées* — et non aux énergies exactes de traitements « théoriques » comme celui de la section III/4.2-b. C'est pour cette raison que les contours d'intégration utilisés pour calculer les hamiltoniens effectifs contiennent les énergies *non perturbées* du système étudié (voir les contours (a), (b), (c) et (e) de la figure IV.1, ainsi que KATO [1949], MESSIAH [1964], SHABAEV and FOKEEVA [1994] et LEPAGE [1977]) : cela permet à Γ d'entourer les singularités des fonctions qui apparaissent dans les calculs *perturbatif* (de la résolvante [KATO 1949 ; MESSIAH 1964], d'un noyau [LEPAGE 1977] ou de la fonction de Green à deux temps [SHABAEV 1993 ; SHABAEV and FOKEEVA 1994]). LEPAGE [1977] propose ainsi d'utiliser, pour retrouver les énergies de son système, un contour *double* qui encercle à la fois l'énergie non perturbée E_0 (connue) et l'énergie perturbée E_α (qu'il cherche à obtenir) — cf. figure IV.1(e).

Ce dernier contour est une amélioration presque parfaite des précédents, puisqu'il possède comme celui de la figure IV.1(d) la propriété de serrer au plus près les énergies exactes auxquelles on s'intéresse (évitant ainsi à Γ de contenir un point de branchement) ; il a de plus l'avantage d'entourer aussi les énergies *non perturbées*, ce qui est nécessaire pour encercler les pôles qui apparaissent dans les calculs perturbatifs. Cependant, LEPAGE [1977] utilise implicitement une hypothèse inutilement restrictive, à savoir qu'aucune énergie exacte du système étudié ne se situe à une énergie non perturbée (ce qui peut pourtant arriver, comme par exemple dans l'effet Zeeman [COHEN-TANNOUJDI *et al.* 1977, § XII-E] lorsque l'on fait varier l'intensité du champ magnétique).

.....
 Deux contours

De plus, et surtout, le contour de la figure IV.1(e) [LEPAGE 1977] masque une réalité conceptuellement importante : d'une part les calculs non perturbatifs d'un hamiltonien effectif peuvent se réaliser grâce à un contour Γ qui encercle *uniquement* les énergies exactes (cf. figure IV.1(d,f)), comme je l'ai fait dans la construction de la section III/4.2-b — les contours des figure IV.1(a-c,e) sont inutilement trop grands pour ce genre de raisonnement théorique — ; d'autre part le calcul *perturbatif* d'un hamiltonien effectif — *i. e.*, dans notre cas, des matrices K (III.39b) et P (III.39c) — doit se réaliser grâce à un contour *différent* (Γ_0), qui encercle (d'aussi près que nécessaire, afin d'éviter les coupures) les énergies *non perturbées*. Nous avons schématiquement représenté ces *deux* contours dans la figure IV.1(f). Je dérive dans l'appendice B une preuve générale de ce résultat, que j'applique dans la section IV/2.3 à la fonction de Green en énergie (III.10).

Il est probable que cette idée d'utiliser un contour différent suivant le type de calcul réalisé (perturbatif ou non) puisse être aisément adaptée aux

¹Nous donnons dans les sections IV/3.3-b et IV/3.3-e un exemple concret de calcul de hamiltonien effectif par la méthode de la fonction de Green à deux temps.

discussions de KATO [1949], MESSIAH [1964] et LEPAGE [1977]. Quant à la méthode de la fonction de Green présentée dans les articles précédemment cités, elle se voit mieux justifiée, grâce à l'usage de ces *deux* contours.

IV/2.2

Résultats obtenus

Je prouve dans l'appendice B un résultat d'une grande importance pratique, car il résout l'une des difficultés mentionnées dans la section III/6 : comment calculer des intégrales¹ sur un contour Γ *inconnu* qui entoure un certain nombre de ses pôles simples ?

Développement
perturbatif

Pour résoudre ce problème, j'étudie d'abord de manière générale le développement perturbatif en α d'une fonction $g_\alpha(E)$ qui contient dans un contour Γ_α des pôles simples (dont la position dépend du paramètre α). La structure analytique de cette fonction $g_\alpha(E)$ est ainsi identique à celle des éléments de matrice (III.33) — cf. section III/2.3-b. J'aboutis dans l'appendice B à une forme générale du développement perturbatif d'une telle fonction singulière, que je présente dans la section IV/2.2-a.

Intégrales
de contour

La forme générale (IV.2) que j'obtiens dans l'appendice B pour le développement perturbatif (en α) de la fonction g_α permet alors d'étudier l'effet des intégrations de contour d'une part sur $g_\alpha(E)$ et d'autre part sur son développement perturbatif. Je décris ainsi dans la section IV/2.2-b comment il est malgré tout possible de calculer perturbativement les matrices K (III.39b) et P (III.39c), bien que l'on ne connaisse par le contour Γ qui les définit.

IV/2.2-a \diamond **Pôles et perturbations**

Pôles non
perturbés

Le développement perturbatif général de la fonction méromorphe $g_\alpha(E)$ auquel j'ai abouti est simple — voir l'Eq. (IV.2) ci-dessous. Dans le cas particulier de la fonction de Green (III.17), il implique la propriété suivante : alors que la fonction de Green (III.17) possède des pôles aux énergies atomiques *exactes* (*i. e.* aux valeurs propres de \hat{H} (II.27)), chaque terme de son développement perturbatif (III.48) possède des pôles aux énergies *non perturbées*² (valeurs propres de \hat{H}_0 (II.12)). Cette propriété mathématique est générale, comme je le montre ci-dessous.

¹Nous rappelons que le hamiltonien effectif (III.39a) est défini à partir d'intégrations de contour donnant les matrices K (III.39b) et P (III.39c).

²Le calcul du hamiltonien effectif (III.39a) à l'aide des matrices K (III.39b) et P (III.39c) semble compromis par ce fait, puisque sa définition (III.39a) repose sur l'existence de pôles aux énergies *exactes* contenues dans le contour Γ (cf. la construction du hamiltonien effectif p. 96). Cependant, la dérivation de l'appendice B résout aussi ce problème — cf. section IV/2.2-b.

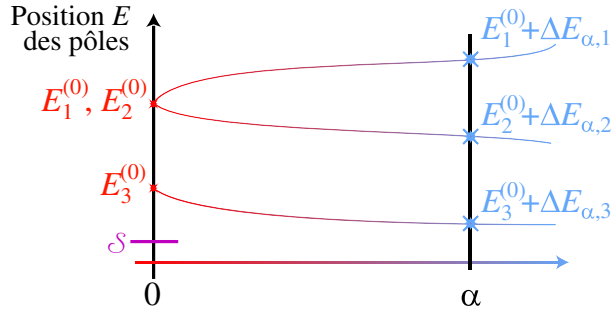


FIG. IV.2 – *Pôles et développement perturbatif*. La figure montre la position de trois pôles (supposés réels pour simplifier) de la fonction (IV.1) en fonction du paramètre α . On peut voir sur ce graphe qu'en $\alpha = 0$, $g_\alpha(E)$ et ses dérivées par rapport à α n'ont de singularités qu'aux énergies *non perturbées* ($\alpha = 0$) $E_{1,2,3}^{(0)}$, puisque ces dérivées se calculent par définition grâce aux valeurs de g_α le long de segments infinitésimaux semblables au segment \mathcal{S} que nous avons représenté (la variable E étant fixée lors de la dérivation par rapport à α).

.....
 Vision
 intuitive et
 définitions

Avant d'arriver par le calcul aux propriétés analytiques du *développement perturbatif* de la fonction de Green (III.17) — ou de ses éléments de matrice (III.33) utilisés dans K (III.39b) et P (III.39c) —, il est possible d'en comprendre intuitivement l'origine.

J'étudie dans l'appendice B une fonction modèle $g_\alpha(E)$ semblable à la fonction de Green (III.17) et dépendant explicitement d'un paramètre α (la constante de structure fine, dans le cas de la fonction de Green à deux temps). La fonction g_α possède par définition un ensemble de pôles *simples*, dont nous isolons s pôles particuliers (dans la section III/4.2, il s'agit des états atomiques dégénérés ou quasi-dégénérés qui nous intéressent) situés aux positions $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$), où les énergies non perturbées $E_k^{(0)}$ sont déplacées par des corrections $\Delta E_{\alpha,k} = \mathcal{O}(\alpha)$. La fonction modèle g_α peut donc s'écrire sous la forme

$$g_\alpha(E) = \left[\sum_{k=1}^s \frac{r_{\alpha,k}(E)}{E - (E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})} \right] + R_\alpha(E), \quad (\text{IV.1})$$

où les $r_{\alpha,k}$ et R_α sont *régulières* aux s pôles $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$.

Nous avons représenté schématiquement dans la figure IV.2 la position des pôles de $g_\alpha(E)$ (IV.1) en fonction du paramètre α . Le développement autour de $\alpha = 0$ de la fonction g_α s'obtient par la formule de Taylor grâce à $g_{\alpha=0}$, $\partial_\alpha|_{\alpha=0} g_\alpha$, etc.; on voit sur la figure IV.2 que ces fonctions sont régulières *en dehors des énergies non perturbées* (c'est évident pour $g_{\alpha=0}$ et vrai pour ses dérivées par rapport à α , si l'on suppose suffisamment de

régularité à la fonction g_α). Ainsi, le *développement perturbatif* de la fonction modèle g_α possède des singularités aux énergies non perturbées $E_k^{(0)}$, bien que g_α possède des singularités aux énergies *exactes* $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$.

Structure
du dévelop-
pement
perturbatif

Plus précisément, je prouve dans l'appendice B que la fonction méromorphe $g_\alpha(E)$ (IV.1) possède un développement perturbatif (en α) de la forme

$$g_\alpha(E) = \left\{ \left[\sum_{k=1}^s \frac{\dots}{E - E_k^{(0)}} \right] + \dots \right\} + \alpha \left\{ \left[\sum_{k=1}^s \frac{\dots}{E - E_k^{(0)}} \right] + \left[\sum_{k=1}^s \frac{\dots}{(E - E_k^{(0)})^2} \right] + \dots \right\} + \dots, \quad (IV.2)$$

où tous les points de suspension, sauf les derniers, représentent des fonctions de E régulières autour des pôles $E_{1,\dots,s}^{(0)}$ de $g_{\alpha=0}(E)$. En d'autres termes, à l'ordre zéro en α , $g_\alpha(E)$ possède des pôles d'ordre *un* en $E = E_{1,\dots,s}^{(0)}$, à l'ordre un en α , $g_\alpha(E)$ possède des pôles d'ordre au plus *deux* en $E = E_{1,\dots,s}^{(0)}$, etc.

La structure (IV.2) a été remarquée par SHABAEV [2000] dans le cas particulier où $g_\alpha(E)$ est la fonction de Green (III.10), et nous la retrouvons dans les calculs explicites de la section V/3. Elle est aussi bien connue pour la *résolvante* $1/(E - H)$ d'un hamiltonien $H \equiv H_0 + \alpha V$, puisqu'un développement perturbatif en α de la résolvante est (voir par exemple KATO [1949])

$$\frac{1}{E - H} = \frac{1}{E - H_0} \sum_{l=0}^{\infty} \alpha^l \left[V \frac{1}{E - H_0} \right]^l. \quad (IV.3)$$

Cependant, la fonction de Green (III.9) n'étant pas définie comme une résolvante, les calculs que l'on effectue par la méthode de la fonction de Green à deux temps ne conduisent en pratique pas à des développements de la forme (IV.3).

IV/2.2-b \diamond Intégrales de contour et perturbations

Résultat
général

Le second résultat que j'ai obtenu concerne directement le calcul perturbatif du hamiltonien effectif (III.39a) grâce aux intégrales de contour (III.39b) et (III.39c) : je prouve dans l'appendice B que pour une fonction singulière comme $g_\alpha(E)$ (IV.1), intégration de contour et développement perturbatif *ne commutent pas*. Cependant, je montre aussi que l'on peut malgré tout calculer perturbativement $\oint_{\Gamma_\alpha} dE g_\alpha(E)$ — généralisation des matrices K (III.39b) et P (III.39c) — : en utilisant à la place du contour Γ_α (qui entoure par définition les énergies exactes $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$))

IV/2. Calcul perturbatif de fonctions singulières

le contour Γ_0 (qui entoure les s pôles non perturbés $E_{1,\dots,s}^{(0)}$); ces deux contours sont représentés dans la figure IV.3. Précisément, en notant le développement perturbatif (en α) de $g_\alpha(E)$ comme

$$g_\alpha(E) = \sum_{j=0}^{\infty} g_{(j)}(E)$$

(où $g_{(j)}(E) \equiv \frac{1}{j!} \alpha^j \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} g_\alpha(E)$ par développement de Taylor), je montre dans l'appendice B que

$$\oint_{\Gamma_\alpha} dE \sum_{j=0}^{\infty} g_{(j)}(E) = \sum_{j=0}^{\infty} \oint_{\Gamma_0} dE g_{(j)}(E) \quad (IV.4)$$

(la commutation s'obtient en *changeant de contour d'intégration*).

.....
 Application
 au
 hamiltonien
 effectif

Le résultat (IV.4), appliqué à la méthode de la fonction de Green à deux temps, montre que les matrices K (III.39b) et P (III.39c) qui définissent le hamiltonien effectif (III.39a) par intégration sur le contour Γ *inconnu* (qui entoure les énergies exactes, *cf.* figure III.7) peuvent (et doivent) être calculées à chaque ordre en α de leurs développements perturbatifs (III.49) par une intégration sur un *autre* contour, Γ_0 , qui encercle par définition les énergies *non perturbées* $E_{\mathbf{n}_1,\dots,\mathbf{n}_s}^{(0)}$ — énergies des s états propres auxquels nous nous intéressons (*cf.* section IV/1.2). Nous avons illustré ce résultat dans la figure IV.3.

Ce résultat est d'une grande importance pratique, puisqu'il montre qu'il n'est pas nécessaire de connaître le contour Γ (*cf.* p. 95) pour calculer perturbativement le hamiltonien effectif (III.39a). La preuve que j'en donne dans l'appendice B permet de justifier les calculs perturbatifs du hamiltonien effectif (III.39a) que l'on trouve dans la littérature, ainsi que ceux que je présente dans ce chapitre et dans le suivant.

IV/2.3

Application à la fonction de Green à deux temps

.....
 Problème
 résolu

Le résultat (IV.4) possède un grand intérêt pratique, puisqu'il impose (et permet) de calculer *perturbativement* les matrices K et P non par des intégrations (III.39b) et (III.39c) sur le contour *inconnu* Γ , mais sur un contour Γ_0 qui encercle une fois chacune des énergies *non perturbées* $E_{\mathbf{n}_1,\dots,\mathbf{n}_s}^{(0)}$ des s états propres $|\mathbf{n}_0^{1,\dots,s}\rangle$ de \hat{H}_0 (les notations sont rappelés dans la section IV/1.2). En d'autres termes, le calcul perturbatif de K et P se fait perturbativement *grâce au contour* Γ_0 (et non Γ) de la façon suivante :

$$K_{ij} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE E \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \otimes \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (IV.5a)$$

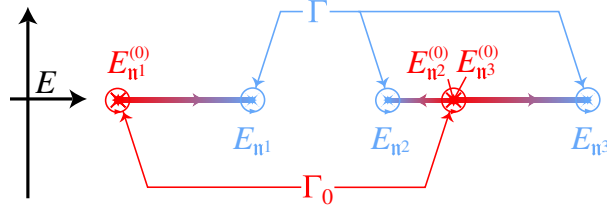


FIG. IV.3 – *Intégrations et développement perturbatif*. Nous avons représenté l'évolution d'énergies non perturbées $E_{n1,2,3}^{(0)}$ (valeurs propres de \hat{H}_0 (II.12)) en énergies exactes $E_{n1,2,3}$ (valeurs propres de \hat{H} (II.27)), par branchement de l'interaction \hat{H}_S^I (II.26). Les intégrations définissant les matrices K (III.39b) et P (III.39c) se font autour des énergies *exactes* (contour Γ de la figure) ; par contre, les développements *perturbatifs* (III.49) de K et P s'obtiennent par intégration de chaque terme autour des énergies *non perturbées* (contour Γ_0 de la figure). Nous avons illustré ici le cas de deux énergies non perturbées dégénérées ($E_{n2}^{(0)}$ et $E_{n3}^{(0)}$) dont la dégénérescence est levée par l'interaction : le contour « exact » Γ et le contour « non perturbé » Γ_0 ne comportent donc pas le même nombre de sous contours.

et

$$P_{ij} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \otimes \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (\text{IV.5b})$$

(où nous avons utilisé la notation (III.48) du développement perturbatif de la fonction de Green).

Pour réaliser explicitement les intégrations (IV.5), il faut trouver un développement perturbatif (III.52) des éléments de matrice utilisés dans K et P , tel que chaque terme possède la forme (B.5) ; en particulier, chacun de ces termes ne doit contenir comme singularités à l'intérieur du contour Γ_0 que des *pôles* (aux énergies non perturbées) — j'ai en effet utilisé cette propriété dans mon raisonnement général (*cf.* (B.7a)). Nous devons donc prolonger analytiquement les éléments de matrice (III.52) fournis par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) — qui ne sont valables que pour des énergies E réelles —, à l'intérieur du contour Γ_0 , en une fonction de E ne possédant que des *pôles* dans cette zone du plan complexe — sans aucune coupure. Un tel prolongement (unique, puisque ne contenant aucune coupure) est l'analogue, au niveau perturbatif, de celui par lequel nous avons défini la fonction de Green exacte (III.10) (*cf.* section III/2.4). Ce point — *nécessaire* à une définition non ambiguë des éléments de matrice (III.52) dans Γ_0 — est développé dans les sections IV/3.3-b et IV/3.3-e.

Le problème de contour mentionné dans la section III/6 est donc résolu, puisqu'un traitement perturbatif rend inutile la connaissance du contour

« exact » Γ , comme illustré dans la figure IV.3, p. 129.

Nouveau
problème

Maintenant qu'est résolu le premier problème décrit dans la section III/6, notre second problème se trouve légèrement *modifié* : nous n'avons plus besoin, pour calculer H_{eff} (III.39a) avec K (III.39b) et P (III.39c), du prolongement analytique (III.10) de la fonction de Green à l'intérieur du contour « exact » Γ ; il est maintenant plutôt souhaitable d'obtenir un développement perturbatif de la fonction de Green (III.17) de la forme (B.5), *prolongé analytiquement* à des énergies E complexes contenues dans le contour « non perturbé » Γ_0 (cf. figure IV.3, p. 129) — sur lequel il ne restera plus qu'à intégrer pour obtenir (perturbativement) les matrices K et P selon (IV.5).

Principe des
calculs
concrets

Notre point de départ pour le développement perturbatif de la fonction de Green (III.9) est l'usage des règles de Feynman (cf. section III/5), qui donnent pour chaque diagramme une contribution aux éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green (valable, nous le rappelons, uniquement pour des énergies E réelles). Je propose dans la section suivante (IV/3) une méthode *graphique* et *systématique* pour obtenir un *développement de la forme (B.5)* pour les intégrandes des matrices K (IV.5a) et P (IV.5b). Chaque diagramme donne ainsi aux développements (III.49) de K et P une contribution (perturbative) de la forme (B.5) qu'il suffit d'intégrer sur le contour « non perturbé » Γ_0 grâce à la formule de Cauchy

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE \frac{f(E)}{(E - E_{n^k}^{(0)})^{l+1}} = \frac{1}{l!} f^{(l)}(E_{n^k}^{(0)}) \quad (\text{IV.6})$$

(où Γ_0 entoure les énergies non perturbées $E_{n^1, \dots, s}^{(0)}$ dans le sens positif et où f est par définition analytique en ces énergies, comme les numérateurs des développements (B.5)).

IV/2.4

Conclusion

J'ai montré (cf. appendice B) comment l'on peut répondre aux problèmes restés ouverts à la section III/6. Nous avons ainsi vu dans la section IV/2.2-b que le hamiltonien effectif (III.39a) peut se calculer en intégrant les développements perturbatifs des matrices K (III.39b) et P (III.39c) sur un contour Γ_0 qui encercle une fois chaque énergie *non perturbée* $E_{n^1, \dots, s}^{(0)}$ — nous n'avons pas besoin de connaître les positions des énergies exactes utilisées par (III.39). D'autre part, le calcul concret des matrices K (IV.5a) et P (IV.5b) peut s'obtenir en développant perturbativement les éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green *sous la forme (B.5)* grâce à la méthode « de la particule fantôme » présentée dans la section suivante ; ceci permet aisément d'obtenir un développement des matrices K et P par

utilisation de la formule de Cauchy (IV.6) et, partant, le hamiltonien effectif (III.39a).

Il ne reste plus qu'à décrire la méthode que je propose pour passer d'un diagramme à sa contribution aux éléments de matrice (III.33) *mise sous la forme* (B.5).

SECTION 3 (Chapitre IV)

Méthode de la particule fantôme

IV/3.1

Introduction

La section précédente a montré qu'un calcul concret (perturbatif) du hamiltonien effectif (III.39a) est accessible dès que l'on sait obtenir les singularités de la fonction de Green (III.9) comme un développement de la forme (B.5) — ce développement de la fonction de Green permettant ensuite d'évaluer les matrices K (IV.5a) et P (IV.5b). De plus, nous avons seulement besoin d'exprimer explicitement ce développement pour des énergies E réelles, puisque d'après la formule de Cauchy (IV.6), cela suffit à évaluer explicitement les intégrations de contour qui définissent les matrices K et P . Cette section fournit les bases techniques de tels calculs, en proposant une méthode *graphique et systématique* pour mettre la contribution de tout diagramme de Feynman aux éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green sous la forme (B.5).

IV/3.2

Principe de la méthode

Avant de décrire les détails techniques de ma méthode « de la particule fantôme », il est utile d'en présenter le principe. Considérons pour cela un certain diagramme \mathcal{D} (comme par exemple (III.59)). Ce diagramme \mathcal{D} contribue aux éléments de matrice (III.33) d'une quantité donnée par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) et que nous noterons $g_{\mathcal{D}}(E)$.

.....
Itérations

La méthode de la particule fantôme permet d'extraire *itérativement* les singularités créées par le diagramme \mathcal{D} considéré (ces singularités sont d'ordre *fini*, un diagramme d'ordre j en α donnant au plus des singularités $j + 1$ -ièmes à l'intérieur du contour Γ_0 — *cf.* (B.5)).

.....
Lire les singularités

Ainsi, partant du diagramme \mathcal{D} , nous décrivons dans la section IV/3.3 comment il est possible d'y lire s'il contient ou non une singularité à l'intérieur du contour « non perturbé » Γ_0 d'intégration — nous identifions souvent par commodité un diagramme (de la forme de (III.59)) avec

sa contribution $g_{\mathcal{D}}(E)$ à un élément de matrice (III.33) de la fonction de Green.

La contribution mathématique d'un diagramme \mathcal{D} aux éléments de matrice (III.52), donnée par les règles de Feynman (*cf.* p. 108), peut se décomposer en de nombreux termes, obtenus en développant tous les propagateurs élémentaires électroniques G et photoniques H en sommes sur des états propres (III.62) et (III.64) :

$$g_{\mathcal{D}}(E) = \sum_{\mathcal{N}} g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}(E), \quad (\text{IV.7})$$

où \mathcal{N} parcourt l'ensemble de tous les choix de termes individuels dans les propagateurs G (III.62) et H (III.64) utilisés dans $g_{\mathcal{D}}(E)$; nous donnerons un exemple concret d'une telle somme sur les « parties » d'un diagramme \mathcal{D} dans (IV.12b). Nous verrons (sections IV/3.3-b et IV/3.3-e) que chaque partie $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}(E)$ possède ses propres singularité en E et qu'il est possible de les déterminer *graphiquement* [SHABAEV 2000, 2002].

.....
 Extraire les singularités

Si l'un des termes $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}(E)$ contient une singularité à l'intérieur de Γ_0 — disons en $E = E_{\mathbf{n}^k}^{(0)}$ — je montrerai (section IV/3.3-c) qu'il est de plus possible de l'extraire *explicitement* de la formule de $g_{\mathcal{D}}(E)$ donnée par les règles de Feynman, en écrivant

$$g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}(E) = \frac{1}{E - E_{\mathbf{n}^k}^{(0)}} \left[\sum_{m=1}^N g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}^m(E) \right], \quad (\text{IV.8})$$

où *chaque* fonction $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}^m(E)$ possède *moins de singularités* que la partie $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}$ de l'élément de matrice $g_{\mathcal{D}}(E)$ dont elle est issue — N est le nombre d'électrons des atomes et ions étudiés (*cf.* section III/2.1).

.....
 D'une fonction à un diagramme

La méthode de la particule fantôme permet alors de faire correspondre à chaque expression *mathématique* $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}^m$ de (IV.8) un *diagramme* $\mathcal{D}_{\mathcal{N}}^m$. Pour construire ce diagramme, j'ai introduit un *propagateur de « particule fantôme »* (représenté comme dans la table IV.1 par des pointillés), qui s'ajoute aux propagateurs électronique (III.26a) et photonique (III.26b) des diagrammes habituels (voir la table III.1, p. 108). Un point crucial de la méthode est qu'il est possible de lire les singularités des *fonctions* $g_{\mathcal{D}_{\mathcal{N}}}^m$ sur les *diagrammes* $\mathcal{D}_{\mathcal{N}}^m$.

Nous pourrions de plus *réitérer* le processus d'extraction de pôle (IV.8) et aboutir à une structure analytique de la forme souhaitée (B.5) pour $g_{\mathcal{D}}(E)$ — *i. e.* pour la contribution du diagramme \mathcal{D} à l'élément de matrice (III.33). Le calcul, par la formule de Cauchy (IV.6), de la contribution du diagramme \mathcal{D} aux matrices K (IV.5a) et P (IV.5b) — et donc au hamiltonien effectif (III.39a) — est évident après application ce processus itératif d'extraction graphique de pôles.

IV/3.3

Résultats fondamentaux

IV/3.3-a \diamond Exemple de la self énergie écrantée

Motivations

Afin d'illustrer les bases de la méthode de la particule fantôme, nous allons continuer de travailler sur l'exemple de la self énergie écrantée (III.53), déjà utilisé pour illustrer les règles de Feynman (*cf.* section III/5) et leur dérivation (*cf.* appendice A). La self énergie écrantée possède l'avantage de ne pas être une contribution triviale au hamiltonien effectif H_{eff} (III.39a); elle nous permettra ainsi d'illustrer dans toute sa généralité le calcul du hamiltonien effectif par la méthode de la particule fantôme.

Élément de matrice

Ainsi que nous l'avons vu dans la section IV/2.3, calculer la contribution à H_{eff} d'un certain diagramme demande de connaître les singularités qu'il induit (dans l'élément de matrice (III.52)) autour des énergies $E_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{s}}^{(0)}$ (*cf.* section IV/1.2 pour les notations). Or, les règles de Feynman nous ont donné la formule (III.68) comme contribution de la self énergie écrantée (III.59) à l'élément de matrice (III.33). Mais les singularités de l'expression (III.68) en $E \in \{E_{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{s}}^{(0)}\}$ ne sont pas du tout évidentes. Nous allons les faire apparaître par la méthode de la particule fantôme.

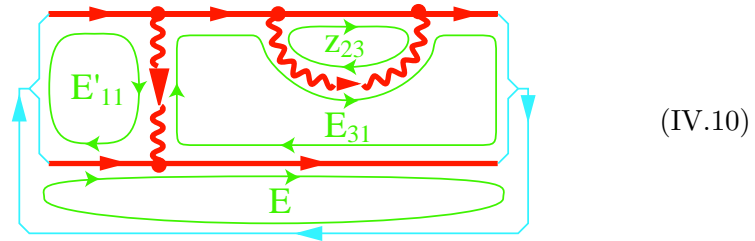
Énergies de maille

Nous pouvons modifier un peu la formule (III.68), en tirant parti des *conservations d'énergie* de l'élément de matrice (III.68); nous pouvons ainsi calculer plusieurs intégrations sur les énergies virtuelles. En privilégiant les énergies E'_{11} et E_{31} , nous effectuons dans (III.68) les intégrations sur toutes les autres énergies virtuelles, ce qui donne

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \mp P}(E \in \mathbb{R}) \otimes \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle = & \\
 \int dE'_{11} dE_{31} dz_{23} \int d^3 \mathbf{y}_1 d^3 \mathbf{y}_2 d^3 \mathbf{y}_3 d^3 \mathbf{y}_4 & \\
 \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 [-(2\pi i)]^5 e^4 (-1)^{PP'} & \\
 \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}_{P(1)}} - E_{31}} \phi_{\mathbf{n}_{P(1)}}^\dagger(\mathbf{y}_3) \alpha^{\nu_3} G(\mathbf{y}_3; \mathbf{y}_2; z_{23}) \alpha^{\nu_2} \right. & \quad (IV.9) \\
 \times G(\mathbf{y}_2; \mathbf{y}_1; E_{31}) \alpha^{\nu_1} \phi_{\mathbf{n}'_{P'(1)}}(\mathbf{y}_1) \frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}'_{P'(1)}} - E'_{11}} & \\
 \left. \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}_{P(2)}} - (E - E_{31})} \phi_{\mathbf{n}_{P(2)}}^\dagger(\mathbf{y}_4) \alpha^{\nu_4} \phi_{\mathbf{n}'_{P'(2)}}(\mathbf{y}_4) \frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}'_{P'(2)}} - (E - E'_{11})} \right) \right. & \\
 \left. \times [H_{\nu_4 \nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; E'_{11} - E_{31}) \times H_{\nu_3 \nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; E_{31} - z_{23})] \right) & .
 \end{aligned}$$

Nous rappelons que dans l'expression de cet élément de matrice, les fonctions d'onde ϕ sont associées par les règles de Feynman aux états électroniques individuels des états non perturbés $|n_0\rangle$ et $|n'_0\rangle$ qui servent à définir l'élément de matrice particulier que l'on étudie (III.33); les propagateurs de Dirac apparaissent sous la forme de la fonction de Green de Dirac G (III.61a) et les propagateurs photoniques sont représentés par la fonction H (III.61b) (voir la table III.1, p. 108, pour plus de détails).

Notre choix d'énergies virtuelles privilégiées — sur lesquelles nous n'avons pas intégré entre (III.68) et (IV.9) — est motivé par la possibilité de représenter *graphiquement* l'énergie virtuelle qui parcourt chaque propagateur, en tenant compte des conservations d'énergie aux points d'interaction. En effet, chacune des énergies virtuelles de (IV.9) peut être associée à une *maille* (par analogie avec l'électricité), de la façon suivante :



(Cette représentation des flux d'énergie virtuelle dans l'expression mathématique (IV.9) est l'analogie direct des *courants de Maxwell* utilisés en électricité.) Ainsi, par exemple, on y lit directement que l'énergie du photon échangé entre les deux lignes électroniques est $E'_{11} - E_{31}$ (*i. e.*, intuitivement, l'énergie virtuelle perdue par l'électron $P'(1)$ lorsqu'il se transforme en l'électron $P(1)$); d'une manière générale, l'énergie virtuelle parcourant un propagateur est la somme algébrique des énergies des mailles adjacentes. La représentation des flux par énergies de mailles est très utile [BJORKEN and DRELL 1965, § 18.4] pour écrire par simple inspection les énergies virtuelles associées aux propagateurs dans l'élément de matrice (IV.9). Ainsi, on lit immédiatement dans (IV.10) les énergies virtuelles parcourant les propagateurs de (IV.9).

IV/3.3-b \diamond **Détermination des pôles**

.....
Introduction

Même après avoir pris en compte dans (IV.9) les conservations d'énergie aux points d'interaction de la self énergie écrantée (III.60), les singularités en $E \in \{E_{n_1, \dots, s}^{(0)}\}$ de l'élément de matrice (IV.9) ne sont pas évidentes.

Étant donné un diagramme — comme par exemple (III.59) —, nous décrivons comment déterminer *graphiquement* quelles singularités (en E) il induit dans les éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green (*cf.* SHABAEV [2000, 2002], qui ne cite malheureusement aucune référence à ce sujet). Des résultats sur les propriétés analytiques de diagrammes de

Feynman similaires à ceux que nous présentons ici (mais obtenus dans un contexte différent), peuvent être trouvés dans STERMAN [1993, Chap. 13] et BJORKEN and DRELL [1965, § 18.6]. Nous donnons dans cette section des procédures pratiques qui permettront à terme de calculer le hamiltonien effectif (III.39a) ; les justifications théoriques de ce que nous avançons peuvent être trouvées dans l'appendice C.

.....
Étiquetage

Chaque singularité en E d'un élément de matrice (III.52) provient d'une *partie* spécifique de son expression mathématique donnée par les règles de Feynman (*cf.* p. 108). Pour le voir, il nous faut décomposer les propagateurs (III.61). Les propagateurs de Dirac G (III.62) et des photons H (III.65) peuvent être écrits de manière simple vis-à-vis de leur énergie virtuelle : nous avons déjà vu la décomposition spectrale (III.62) du propagateur de Dirac :

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{x})\phi_n^\dagger(\mathbf{x}')}{\varepsilon_n^- - E}, \quad (\text{IV.11a})$$

où la somme s'effectue sur tous les états propres ϕ_n de Dirac, d'énergie propre ε_n (*cf.* section II/1.2-a), et où ε_n^- représente l'énergie ε_n tournée d'un angle négatif infiniment petit — *cf.* (III.63) ; pour le propagateur photonique, nous avons obtenu (III.64) la forme suivante, qui est simple du point de vue de l'énergie virtuelle q du propagateur :

$$H_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; q) = g_{\mu\nu} \frac{-1}{(2\pi)^3} \sum_{\epsilon=\pm 1} \int d^3\mathbf{k} \frac{\epsilon}{2\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}}{(\epsilon\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2})^- - q}, \quad (\text{IV.11b})$$

et qui peut se comprendre comme une somme sur les quantités de mouvement $\hbar\mathbf{k}$ des photons ; en comparant (IV.11b) et (IV.11a), on reconnaît l'énergie $\pm\sqrt{(\hbar\mathbf{k})^2 c^2 + \mu^2 c^4}$ d'un photon¹ de quantité de mouvement $\hbar\mathbf{k}$ et de masse μ .

Grâce aux décompositions spectrales (IV.11) des propagateurs élémentaires utilisés par les règles de Feynman, tout élément de matrice (III.52) de la fonction de Green peut s'écrire comme une somme de contributions : par exemple, notre élément de matrice (IV.9) se décompose grâce à (IV.11) comme

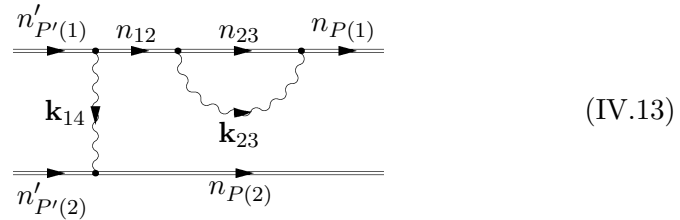
$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \overline{P} P} (E \in \mathbb{R}) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle \\ &= \sum_{n_{12}, n_{23}, \mathbf{k}_{14}, \mathbf{k}_{23}} \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \overline{P} P} (E \in \mathbb{R}; n_{12}, n_{23}, \mathbf{k}_{14}, \mathbf{k}_{23}) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{IV.12a})$$

¹Les énergies négatives que l'on obtient ici sont l'analogie des énergies négatives de la décomposition spectrale (IV.11a) : elles correspondent formellement à des énergies d'« anti-photon » (rappelons que le photon est sa propre anti-particule).

où chaque terme $\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P', \mp \mp P}(E \in \mathbb{R}; n_{12}, n_{23}, \mathbf{k}_{14}, \mathbf{k}_{23}) \otimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle$ représente un choix particulier d'état propre pour chaque propagateur interne du diagramme (III.60) :

$$\begin{aligned}
 & \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P', \mp \mp P}(E \in \mathbb{R}; n_{12}, n_{23}, \mathbf{k}_{14}, \mathbf{k}_{23}) \otimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle \equiv \\
 & \int dE'_{11} dE_{31} dz_{23} \int d^3 \mathbf{y}_1 d^3 \mathbf{y}_2 d^3 \mathbf{y}_3 d^3 \mathbf{y}_4 \\
 & \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 [-(2\pi i)]^5 e^4 (-1)^{PP'} \\
 & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}_{P(1)}} - E_{31}} \phi_{n_{P(1)}}^\dagger(\mathbf{y}_3) \alpha^{\nu_3} \frac{\phi_{n_{23}}(\mathbf{y}_3) \phi_{n_{23}}^\dagger(\mathbf{y}_2)}{\varepsilon_{n_{23}} - z_{23}} \alpha^{\nu_2} \right. \\
 & \quad \times \left. \frac{\phi_{n_{12}}(\mathbf{y}_2) \phi_{n_{12}}^\dagger(\mathbf{y}_1)}{\varepsilon_{\bar{n}_{12}} - E_{31}} \alpha^{\nu_1} \phi_{n'_{P'(1)}}(\mathbf{y}_1) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(1)}} - E'_{11}} \right) \\
 & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\bar{n}_{P(2)}} - (E - E_{31})} \phi_{n_{P(2)}}^\dagger(\mathbf{y}_4) \alpha^{\nu_4} \phi_{n'_{P'(2)}}(\mathbf{y}_4) \frac{1}{\varepsilon_{n'_{P'(2)}} - (E - E'_{11})} \right) \\
 & \times \left[\frac{-g_{\nu_4 \nu_1}}{(2\pi)^3} \sum_{\epsilon_{14}=\pm 1} \frac{\epsilon_{14}}{2\sqrt{\mathbf{k}_{14}^2 + \mu^2}} \frac{e^{i\mathbf{k}_{14} \cdot (\mathbf{y}_4 - \mathbf{y}_1)}}{(\epsilon_{14}\sqrt{\mathbf{k}_{14}^2 + \mu^2})^- - (E'_{11} - E_{31})} \right] \\
 & \times \left[\frac{-g_{\nu_3 \nu_2}}{(2\pi)^3} \sum_{\epsilon_{23}=\pm 1} \frac{\epsilon_{23}}{2\sqrt{\mathbf{k}_{23}^2 + \mu^2}} \frac{e^{i\mathbf{k}_{23} \cdot (\mathbf{y}_3 - \mathbf{y}_2)}}{(\epsilon_{23}\sqrt{\mathbf{k}_{23}^2 + \mu^2})^- - (E_{31} - z_{23})} \right].
 \end{aligned} \tag{IV.12b}$$

De la même manière que l'élément de matrice (IV.12a) de la self énergie écrantée est représenté par les règles de Feynman par le diagramme (III.59), son terme (IV.12b) peut être visualisé comme

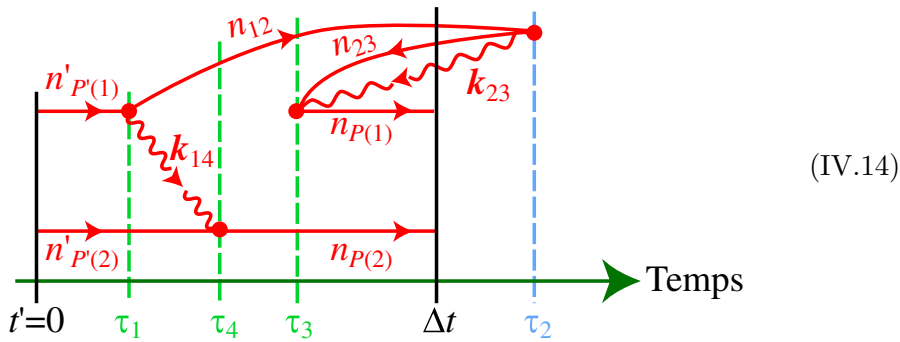


Cette décomposition (IV.12b) de l'élément de matrice (IV.9) par étiquetage individuel (IV.13) de chacun des propagateurs qu'il contient est un exemple concret de la décomposition théorique (IV.7) dont nous avons donné plus haut le principe (section IV/3.2). Chaque terme (IV.12b) contribue *individuellement* à des singularités en E , dont on peut déterminer *graphiquement* la position — qui n'est pas évidente dans l'expression (IV.12b) —, de la façon suivante.

Ordonnancements temporels

Afin de déterminer à quelles singularités donne naissance une partie (IV.12b) de l'élément de matrice (IV.12a), il faut suivre le chemin inverse de celui qui aboutit aux règles de Feynman (*cf.* appendice A) : il est nécessaire de revenir à des interactions qui ont lieu à des *instants* donnés [STERMAN 1993, § 9.5], comme dans le propagateur (III.25b).

Ainsi, pour trouver les singularités en E de (IV.12b), nous partons du diagramme de la self énergie écrantée (III.60), associons le temps $t' = 0$ aux électrons entrants et Δt aux électrons sortants et des temps $\tau_{1,\dots,4}$ aux quatre points d'interaction — comme dans (III.29). Ensuite, supposons par exemple que dans (IV.12b) l'état n_{12} soit un électron (*i. e.* $\varepsilon_{n_{12}} > 0$) et l'état n_{23} un positron (*i. e.* $\varepsilon_{n_{23}} < 0$) ; afin de pouvoir lire les singularités en E d'un tel terme (IV.12b), il suffit de dessiner le diagramme (III.60) avec des flèches se dirigeant vers les temps croissants pour les états électroniques et les temps décroissants pour les états positroniques, comme par exemple



On remarque sur ce graphique que nous avons ordonné les temps d'interaction de façon à ce que les propagateurs électroniques soient en accord avec l'état propre qui les parcourt (seul l'état n_{23} est un positron, dans notre exemple).

En général, *plusieurs* ordonnancements temporels des interactions sont réalisables sous cette contrainte (par exemple, nous aurions pu ici placer τ_2 entre τ_3 et Δt), et tous les ordonnancements temporels possibles doivent être considérés afin de connaître l'ensemble des singularités en E d'un terme (IV.12b) ; cependant, d'après les principes exposés dans la section IV/3.2, l'extraction *progressive* des pôles (IV.8) ne demande que de trouver *un* pôle à chaque étape, ce qui limite grandement, en pratique, le nombre d'ordonnancements temporels qu'il est nécessaire d'inspecter pour mettre les éléments de matrice (III.52) sous la forme recherchée (B.5).

Position des singularités

Grâce à des schémas comme (IV.14), on peut aisément *lire* les singularités données par un diagramme — ici (III.59) — aux termes individuels des éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green — *cf.* (IV.12a). Cela peut s'effectuer de la manière suivante : si $\Delta t > 0$, *chaque intervalle de*

temps entre deux points d'interaction compris entre $t' = 0$ et Δt contribue à une *singularité* de l'élément de matrice (III.52), située un peu en dessous¹ de l'énergie totale des états qui se propagent durant cet intervalle ; cette énergie totale est par définition la somme des *valeurs absolues*² des énergies propres contenues dans une tranche de temps.

Prenons l'exemple du diagramme (IV.14) pour illustrer ce résultat important et simple à mettre en pratique : nous y distinguons entre $t' = 0$ et Δt quatre intervalles, séparés par les temps $t' = 0 < \tau_1 < \tau_4 < \tau_3 < \Delta t$; selon (IV.14), ces intervalles donnent autant de singularités à (IV.9), en E égal à

$$\mathcal{E}_1 = |\varepsilon_{n'_{P'(1)}}| + |\varepsilon_{n'_{P'(2)}}| - i0 \quad 0 < t < \tau_1 \quad (\text{IV.15a})$$

$$\mathcal{E}_2 = |\varepsilon_{n_{12}}| + \sqrt{\mathbf{k}_{14}^2 + \mu^2} + |\varepsilon_{n'_{P'(2)}}| - i0 \quad \tau_1 < t < \tau_4 \quad (\text{IV.15b})$$

$$\mathcal{E}_3 = |\varepsilon_{n_{12}}| + |\varepsilon_{n_{P(2)}}| - i0 \quad \tau_4 < t < \tau_3 \quad (\text{IV.15c})$$

$$\mathcal{E}_4 = |\varepsilon_{n_{12}}| + \sqrt{\mathbf{k}_{23}^2 + \mu^2} + |\varepsilon_{n_{23}}| + |\varepsilon_{n_{P(1)}}| + |\varepsilon_{n_{P(2)}}| - i0 \quad \tau_3 < t < \Delta t \quad (\text{IV.15d})$$

où ε_n est l'énergie de l'état propre de Dirac ϕ_n (cf. (II.1)) et où $\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}$ est l'énergie d'un photon (fictif) de quantité de mouvement $\hbar\mathbf{k}$ et de masse μ . On remarque que ces singularités sont situées à des énergies propres du hamiltonien *non perturbé* (II.12), si bien que l'on retrouve la structure perturbative (B.5) dans chaque terme (IV.12b) *individuel* (ce qui permet de connaître à un niveau très fin l'origine des singularités d'un élément de matrice comme (IV.9)).

Les autres ordonnancements temporels à considérer pour trouver les singularités du terme (IV.9) — *i. e.* de (IV.13) — donnent chacun un ensemble de pôles, en général différent de (IV.15). Comme justifié dans l'appendice C, la structure analytique d'un diagramme étiqueté — comme (IV.13) — est donnée par la *somme* des structures analytiques de chaque ordonnancement temporel ; ainsi, par exemple, si deux ordonnancements temporels de (IV.13)

¹Nous entendons par là que les singularités possèdent dans le cas $\Delta t > 0$ une partie imaginaire négative infiniment petite (cf. appendice C). Par exemple, cela signifie que les singularités du terme (IV.12b) sont situées *sur l'axe réel* (puisque les singularités tendent vers cet axe), et que la valeur du terme (IV.12b) sur cet axe est obtenue en approchant *par le haut* toute coupure éventuellement présente sur l'axe — *i. e.* depuis le demi-plan de partie imaginaire positive.

²Si $\Delta t < 0$, les singularités sont situés aux valeurs *opposées* aux énergies totales des intervalles (cf. appendice C). Les ordonnancements temporels où $\Delta t < 0$ ne contribuent donc pas aux singularités contenues dans Γ_0 , qui sont les seules dont nous avons besoin (cf. section IV/2.3).

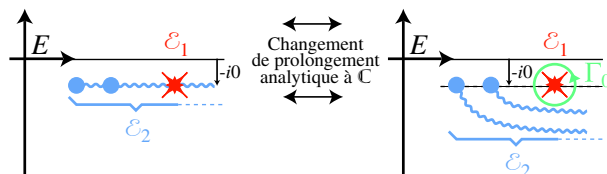


FIG. IV.4 – *Singularités créées par un diagramme de Feynman.* L’ordonnancement temporel (IV.14) crée entre autres des singularités en $E = \mathcal{E}_1$ (IV.15a) et $E = \mathcal{E}_2$ (IV.15b) dans les éléments de matrice (IV.9) de la fonction de Green. La singularité \mathcal{E}_1 est située à l’énergie d’un niveau isolé et donne donc un *pôle simple* ; au contraire, la singularité en \mathcal{E}_2 contribue à des *coupures* dans le plan de E car elle est située à l’énergie d’un état contenant un photon, dont l’énergie peut varier continûment. Ces coupures peuvent être *déplacées* par prolongement analytique, ce qui permet de définir de façon *non ambiguë* l’élément de matrice (IV.9) autour de $E = \mathcal{E}_1$.

indiquent respectivement la présence de singularités en $\mathcal{E}_{1,2}^a$ et en $\mathcal{E}_{1,2,3}^b$, celles-ci participent à la structure analytique de (IV.12b) par un terme

$$\left(\cdots \frac{1}{E - \mathcal{E}_1^a} \frac{1}{E - \mathcal{E}_2^a} \right) + \left(\cdots \frac{1}{E - \mathcal{E}_1^b} \frac{1}{E - \mathcal{E}_2^b} \frac{1}{E - \mathcal{E}_3^b} \right)$$

où les points de suspension représentent des fonctions de E analytiques dans Γ_0 .

Nature des singularités

Les singularités (IV.15) de l’élément de matrice (IV.9) créées par le diagramme d’ordonnancement temporel (IV.14) ne sont pas toutes de la même nature (voir l’appendice C et SHABAEV [2000] ou SHABAEV [2002]). En effet, les énergies des états propres associés aux propagateurs de (IV.14) peuvent varier (*cf.* la sommation de l’élément de matrice (IV.12a)), ce qui fait aussi se déplacer les singularités (IV.15). En conséquence (*cf.* appendice C), une singularité dont la position varie *continûment* trace dans le plan complexe du paramètre E une *coupure* de l’élément de matrice (III.52) — c’est par exemple le cas de \mathcal{E}_2 (IV.15b) et de \mathcal{E}_4 (IV.15d), à cause du continuum de fréquences des photons échangés dans (IV.14) ; au contraire, si une singularité ne se déplace pas continûment — comme par exemple \mathcal{E}_1 (IV.15a) —, alors elle donne un *pôle simple* à l’élément de matrice (III.52). Nous avons illustré ces deux types de singularités dans la figure IV.4(a).

Notons que l’existence de coupures (en E) montre que le prolongement à $E \in \mathbb{C}$ des éléments de matrice (III.52) — donnés pour $E \in \mathbb{R}$ par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) — ne se fait pas de manière *unique* : les coupures peuvent être déplacées pour donner plusieurs prolongements analytiques. Cette liberté permet de se ramener au cadre de nos développements théoriques sur le lien entre singularités et perturbations (section IV/2) : en

déplaçant convenablement les coupures, on peut¹ aboutir à un prolongement (unique) des éléments de matrice (III.52), tel que ceux-ci ne possèdent *que des pôles simples à l'intérieur du contour \hat{H}_0* (*i. e.* des pôles aux énergies non perturbées); nous avons illustré cette procédure dans la figure IV.4. Les éléments de matrice (III.52) ont ainsi exactement² la structure analytique (B.5), qui m'a permis de montrer qu'un calcul perturbatif des matrices K (III.39b) et P (III.39c) devait se réaliser par intégration sur le contour « non perturbé » Γ_0 — *cf.* (IV.5).

Pôles
particuliers

Le rôle du pôle \mathcal{E}_1 (IV.15a) est particulier : il est situé à l'énergie de l'état « entrant » du diagramme, *i. e.* à l'énergie de l'état $|n'_0\rangle$ donnée par \hat{H}_0 (II.12) — rappelons que $|n'_0\rangle$ est l'un des deux états entre lesquels nous calculons la fonction de Green (*cf.* (IV.9)). On peut se convaincre aisément qu'il est *toujours* possible d'ordonner les interactions en un diagramme qui confère à l'élément de matrice correspondant des pôles aux énergies des états « externes » — *i. e.* aux énergies propres données par \hat{H}_0 (II.12) pour les états $|n_0\rangle$ et $|n'_0\rangle$ entre lesquels on calcule l'élément de matrice (III.52) dont on cherche les singularités. Comme nous l'illustrerons dans le chapitre V, ces deux singularités évidentes (car présentes dans tout diagramme) permettent de repérer d'emblée certains pôles et donc d'effectuer rapidement les premières étapes des calculs de hamiltonien effectif selon la méthode esquissée dans la section IV/3.2.

IV/3.3-c \diamond Extraction des pôles

Nous venons de voir comment on peut *en principe* lire la structure analytique conférée aux éléments de matrice (III.52) par chaque diagramme de Feynman — structure qui coïncide avec celle requise pour calculer le hamiltonien effectif (*cf.* section IV/2). Cependant, un calcul concret du hamiltonien effectif (III.39a) demande d'obtenir un développement *explicite* des éléments de matrice (III.33), de la forme (B.5) — il s'agit là du but même de la méthode de la particule fantôme.

¹Ceci suppose qu'aucun point de branchement n'est exactement situé sur l'une des énergies non perturbées; ceci est toujours réalisable en modifiant légèrement la masse μ des photons, qui détermine la position des points de branchement qui peuvent poser problème — *cf.* (IV.15b).

²Nous retrouvons aussi correctement l'*ordre* des singularités des développements (B.5). Pour s'en convaincre, prenons par exemple le cas des photons : pour passer d'un diagramme à un autre d'ordre supérieur (en α), il faut lui ajouter un propagateur photonique; les deux points d'interaction additionnels contribuent à deux intervalles de temps supplémentaires, dont au moins un participe à une coupure, du fait de la présence du photon [SHABAEV 2000, 2002] : le nombre de pôles aux énergies non perturbées ne peut donc augmenter que de *un* à chaque ordre en α . D'autre part, à l'ordre zéro en α , la fonction de Green possède bien des pôles d'ordre un aux énergies non perturbées (*cf.* (III.36)). Par récurrence, on voit donc qu'un diagramme d'ordre l en α possède des pôles d'ordre $l + 1$ au plus.

Exemple Poursuivons notre exemple de la self énergie écrantée (III.59) pour illustrer le principe de cette méthode. L'ordonnement temporel (IV.14) nous a indiqué la présence d'un pôle¹ de (IV.9), en $E = \varepsilon_{n'_{P'(1)}} + \varepsilon_{n'_{P'(2)}} - i0$ — cf. (IV.15a). Ce pôle peut être rendu explicite dans l'élément de matrice (IV.9) en remarquant que l'un des ses facteurs peut être transformé selon

$$\begin{aligned} & \frac{1}{[\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- - E'_{11}]} \frac{1}{[\varepsilon_{n'_{P'(2)}}^- - (E - E'_{11})]} & \text{(IV.16)} \\ & = \frac{1}{E - (\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- + \varepsilon_{n'_{P'(2)}}^-)} \left[\frac{1}{(-1) [\varepsilon_{n'_{P'(2)}}^- - (E - E'_{11})]} + \frac{1}{[\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- - E'_{11}] (-1)} \right], \end{aligned}$$

où j'ai explicité les dénominateurs (-1) pour montrer qu'ils *remplacent* successivement les dénominateurs du premier membre — ce qui permettra de représenter (IV.16) graphiquement (cf. section IV/3.3-d).

Ainsi, grâce à (IV.16), les dénominateurs de (IV.9) attachés aux deux propagateurs « entrants » du diagramme (III.60) sont combinés pour extraire explicitement le pôle en $E = \mathcal{E}_1$ (IV.15a) que nous avons identifié

¹Nous supprimons les valeurs absolues de (IV.15a) grâce au fait que les états atomiques non perturbés sont composés d'électrons, dont l'énergie de Dirac est *positive*.

graphiquement — *cf.* (IV.14) — :

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \Gamma_0 P}(E \in \mathbb{R}) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle = & \\
 & \frac{1}{E - (\varepsilon_{n'_{P'(1)}} + \varepsilon_{n'_{P'(2)}})} \\
 & \times \int dE'_{11} dE_{31} dz_{23} \int d^3 \mathbf{y}_1 d^3 \mathbf{y}_2 d^3 \mathbf{y}_3 d^3 \mathbf{y}_4 \\
 & \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 [-(2\pi i)]^5 e^4 (-1)^{PP'} \tag{IV.17} \\
 & \times \left[\frac{1}{(-1) [\varepsilon_{n'_{P'(2)}}^- - (E - E'_{11})]} + \frac{1}{[\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- - E'_{11}] (-1)} \right] \\
 & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}}^- - E_{31}} \phi_{n_{P(1)}}^\dagger(\mathbf{y}_3) \alpha^{\nu_3} \left(\sum_{n_{23}} \frac{\phi_{n_{23}}(\mathbf{y}_3) \phi_{n_{23}}^\dagger(\mathbf{y}_2)}{\varepsilon_{n_{23}}^- - z_{23}} \right) \alpha^{\nu_2} \right. \\
 & \quad \left. \times G(\mathbf{y}_2; \mathbf{y}_1; E_{31}) \alpha^{\nu_1} \phi_{n'_{P'(1)}}(\mathbf{y}_1) \right) \\
 & \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}}^- - (E - E_{31})} \phi_{n_{P(2)}}^\dagger(\mathbf{y}_4) \alpha^{\nu_4} \phi_{n'_{P'(2)}}(\mathbf{y}_4) \right) \\
 & \times [H_{\nu_4 \nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; E'_{11} - E_{31}) H_{\nu_3 \nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; E_{31} - z_{23})],
 \end{aligned}$$

où nous avons utilisé la limite qui définit les énergies déplacées ε^- (III.63) pour remplacer le dénominateur $E - (\varepsilon_{n'_{P'(1)}}^- + \varepsilon_{n'_{P'(2)}}^-)$ de (IV.16) par $E - (\varepsilon_{n'_{P'(1)}} + \varepsilon_{n'_{P'(2)}})$, grâce à

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\substack{\eta_1 \rightarrow 0^+ \\ \eta_2 \rightarrow 0^+}} \left\{ \frac{1}{E - [\varepsilon_{n'_{P'(1)}} (1 - i\eta_1) + \varepsilon_{n'_{P'(2)}} (1 - i\eta_2)]} [\dots] \right\} \\
 & = \frac{1}{E - [\varepsilon_{n'_{P'(1)}} + \varepsilon_{n'_{P'(2)}}]} \lim_{\substack{\eta_1 \rightarrow 0^+ \\ \eta_2 \rightarrow 0^+}} [\dots] \tag{IV.18}
 \end{aligned}$$

(qui se justifie par le fait que la variable E de (IV.17) n'est pas utilisée dans une intégrale le long du contour \mathbb{R} , mais le long de Γ_0 — *cf.* section IV/2.3). Nous avons explicité la décomposition spectrale (IV.11a) de l'un des propagateurs pour préparer la discussion qui suit (*cf.* section IV/3.3-e). Nous avons donc abouti grâce à (IV.16) à un élément de matrice (IV.17) mis sous la forme (IV.8), qui est adaptée au programme annoncé dans la section IV/3.2. D'un unique diagramme (III.59), nous avons finalement obtenu un élément de matrice (IV.17) qui contient *deux* termes (*cf.* section IV/3.2) — chacun provenant directement de (IV.16). Avant de voir comment obtenir

la structure analytique de chacun des deux termes de (IV.17), suivant le programme de la section IV/3.2, nous allons montrer le caractère systématique de la procédure (IV.16), qui nous a permis de passer d'un pôle prédit par une étude graphique (IV.14) à une expression mathématique explicite (IV.17).

.....
Généralisation

L'extraction explicite de pôles que nous venons d'utiliser sur un cas particulier se généralise à *tout pôle* contenu dans le contour non perturbé Γ_0 (*i. e.* aux pôles qui nous intéressent — *cf.* section IV/2.3) et à tout diagramme. Les calculs sur la self énergie écrantée que j'effectue plus loin en illustration (chapitre V) permettront d'illustrer concrètement le caractère systématique de la méthode de la particule fantôme. J'en donne ici une preuve, pour référence. Je démontre successivement que deux points cruciaux de la formule (IV.16) sont toujours vérifiés, quels que soient le diagramme et la singularité qu'on y a trouvée : d'une part les seuls pôles qui peuvent tomber dans le contour Γ_0 sont situés à la somme de N énergies *électroniques* (sans contribution d'énergies propres de positrons ou de photons ; il s'agissait des énergies $\varepsilon_{n'_{P'(1)}}$ et $\varepsilon_{n'_{P'(2)}}$, dans (IV.16)) ; d'autre part, les énergies virtuelles des propagateurs que l'on cherche à combiner pour faire apparaître explicitement un pôle de (III.52) ont *toujours E pour somme*, *i. e.* exactement le paramètre des éléments de matrice (III.52) (il s'agissait dans (IV.16) des énergies virtuelles E'_{11} et $(E - E'_{11})$ des propagateurs « entrants » du diagramme (IV.10)).

Le premier point du raisonnement consiste ainsi à remarquer que les seuls *pôles* de l'élément de matrice (III.52) contenus dans Γ_0 (après prolongement analytique de $E \in \mathbb{R}$ à l'intérieur de Γ_0) sont dûs à des intervalles de temps durant lesquels ne se propagent *que des électrons*. Afin de le voir, examinons successivement les singularités créées par des intervalles contenant des photons et des positrons.

D'une part, comme nous l'avons vu, les *photons* ne provoquent que des coupures dans le plan de l'énergie E de (III.52), coupures que l'on doit déplacer par prolongement analytique afin de définir de manière unique les éléments de matrice (III.52) dans Γ_0 , ainsi que pour donner à (III.52) la forme perturbative (B.5) — *cf.* section IV/2.3. De plus, si jamais le point de branchement d'une coupure créée par un photon tombe exactement sur une énergie non perturbée $E_{n_1, \dots, s}^{(0)}$, il est toujours possible de l'en éloigner en modifiant légèrement la masse artificielle μ des photons (*cf.* section III/2.3-c).

D'autre part, tout comme pour les photons, les états propres de Dirac (II.1) d'énergie négative forment un *continuum* (*cf.* section II/1.2-a), et sont donc eux aussi uniquement responsables de *coupures* dans les éléments de matrice (III.52) — coupures que l'on *doit* écarter de Γ_0 pour obtenir un prolongement analytique unique de (III.52) à Γ_0 , mais que l'on ne *peut* écarter que si leur point de branchement n'est pas situé exactement à une énergie non perturbée $E_{n_1, \dots, s}^{(0)}$ (nous ne pouvons pas jouer avec la liberté laissée par la masse arbitraire des photons, ici). Mais en fait, nous avons une

propriété encore plus forte à notre disposition, pour montrer que les intervalles de temps durant lesquels se propagent des positrons ne contribuent pas aux pôles contenus dans Γ_0 : aucune coupure *ni point de branchement* dû à un intervalle de temps contenant des positrons ne passe dans Γ_0 : en effet, entre $t' = 0$ et Δt , dans un diagramme comme (IV.14), tout instant contient N électrons¹ plus un certain nombre de *paires² électron-positron* (photons non compris) ; en conséquence, la singularité due à un intervalle (compris entre $t' = 0$ et $\Delta t > t'$) qui ne contient que des électrons et des positrons est située à l'énergie d'un *état propre de \hat{H}_0* (II.12), de charge Nq_e . Or nous nous sommes placé implicitement dans l'étude perturbative de niveaux atomiques obtenus par branchement de l'interaction (II.26) à partir de s niveaux non perturbés $|\mathbf{n}_0^{1,\dots,s}\rangle$ (dégénérés ou quasi-dégénérés) constitués *uniquement d'électrons* (cf. la définition du hamiltonien effectif section III/4.2-a et la définition (III.33) des éléments de matrice qu'elle utilise) : les états contenant aussi des positrons ont des énergies (non perturbées) très éloignées de Γ_0 .

En conclusion, dans les ordonnancements temporels comme (IV.14), seuls les intervalles de temps (compris entre $t' = 0$ et $\Delta t > t'$) ne contenant *que des électrons* (*i. e.* des flèches dans le sens des temps croissants) contribuent aux singularités du prolongement analytique des éléments de matrice (III.52) de $E \in \mathbb{R}$ à l'intérieur de Γ_0 . D'un point de vue pratique, ce résultat possède le grand avantage de permettre de ne considérer que *quelques* ordonnancements temporels (IV.14) pour y lire la présence ou l'absence de pôles dans Γ_0 — *i. e.* pour trouver les seules singularités dont nous avons besoin pour calculer les matrices K (IV.5a) et P (IV.5b), comme vu dans la section IV/2.3.

Il suffit ainsi de chercher dans les ordonnancements temporels (comme (IV.14)) les intervalles de temps contenant *exactement* N électrons, et dont l'énergie totale vaut l'une des $E_{\mathbf{n}^{(0),1,\dots,s}}$: les autres intervalles ne donneront jamais de singularités dans Γ_0 . Ainsi, pour un intervalle qui contient des électrons d'énergies $\varepsilon_{1,\dots,N}$ telles que $\sum_{i=1}^N \varepsilon_i = E_{\mathbf{n}^k}^{(0)}$ (pour un certain niveau k parmi les s niveaux étudiés), on peut chercher à extraire *explicitement* de l'élément de matrice (III.52) le pôle créé par ces N électrons, à la manière de (IV.16) : tout comme pour les éléments de matrice partiels (IV.12b), chaque électron i de l'intervalle donnant le pôle est associé à un *dénominateur* de la forme

$$\frac{1}{\varepsilon_i^- - z_i},$$

où z_i est l'énergie virtuelle qui traverse le propagateur i — voir les règles

¹Rappelons que ce N définit la charge Nq_e des états propres de \hat{H} (II.27) auxquels on s'intéresse, *i. e.* ceux représentant des atomes et ions à N électrons ; cf. section II/1.3-c.

²On peut se convaincre de ce dénombrement en le considérant comme une propriété de conservation de la charge dans les diagrammes d'ordonnement temporel — cf. (IV.14).

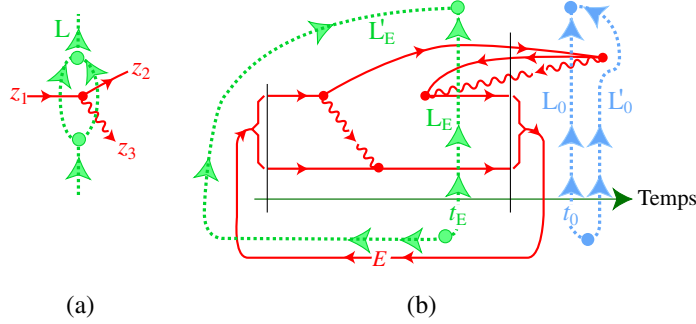


FIG. IV.5 – *Énergies virtuelles et pôles*. La figure (a) illustre le passage d'une ligne orientée L au travers d'un point d'interaction où les énergies virtuelles sont conservées ($z_1 = z_2 + z_3$) : l'énergie algébrique traversant L est constante. La figure (b) montre que dans un ordonnancement temporel (*cf.* section IV/3.3-b), tout instant t_E compris entre $t' = 0$ et $\Delta t > 0$ contient des propagateurs d'énergie virtuelle totale égale à E : la ligne L_E peut être déformé en la courbe L'_E , seulement traversé par l'énergie E ; au contraire, les propagateurs du temps t_0 (ligne L_0) ont une énergie virtuelle totale *null* (contour L'_0).

de Feynman de la p. 108 et la décomposition (IV.11a) de G . Toujours dans le but de généraliser la formule d'extraction (IV.16), nous pouvons combiner les dénominateurs des N électrons impliqués dans le pôle, à la manière de (IV.16) :

$$\prod_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i^- - z_i} = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^N z_i\right) - \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon_i^-\right)} \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{-1} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{\varepsilon_i^- - z_i} \right) ; \quad (\text{IV.19})$$

dans le deuxième membre de cette équation apparaît une somme similaire à celle de (IV.16), avec chaque dénominateur du premier membre successivement remplacé par un facteur (-1) que nous avons rendu explicite afin de pouvoir représenter graphiquement (IV.19) (*cf.* section IV/3.3-d). Dans (IV.16), l'énergie virtuelle totale $\sum_{i=1}^N z_i$ des propagateurs impliqués dans le pôle était égale à E , l'argument de l'élément de matrice (IV.12a). Cette propriété importante permettait de faire apparaître mathématiquement le pôle en E .

Le deuxième point du raisonnement qui permet de systématiser, grâce à (IV.19), l'extraction explicite (IV.16) consiste donc à montrer que la somme des énergies virtuelles¹ $\sum_{i=1}^N z_i$ vaut exactement E . Ce résultat est le

¹Les énergies virtuelles qui nous intéressent ici sont toujours uniquement celles de N termes de propagateurs qui donnent un pôle dans Γ_0 à l'élément de matrice (III.52), *i. e.* celles de N propagateurs électroniques.

reflet d'une propriété plus générale de conservation d'énergie, que nous avons illustrée dans la figure IV.5 : lorsque l'on prend un diagramme destiné à appliquer les règles de Feynman (*i. e.*, avec énergies virtuelles, comme (III.60)), qu'on en étudie un certain ordonnancement temporel (comme ceux définis dans la section IV/3.3-b, *cf.* (IV.14)), pour tout temps t_E compris entre $t' = 0$ et $\Delta t > t'$, la somme *algébrique* des énergies virtuelles traversant cet instant vaut toujours E — le paramètre de la fonction de Green (III.10) —, cette « somme algébrique » étant par définition la somme des énergies virtuelles des propagateurs qui « coupent » l'instant t_E , affectées du signe $+$ si le propagateur est orienté vers le temps croissants (électrons, photons) et du signe $-$ dans le cas contraire (positrons ou photons). La figure IV.5 démontre ce résultat de façon graphique.

Or, nous venons de voir que les seuls pôles créés par un diagramme dans le contour non perturbé Γ_0 étaient dûs à des intervalles de temps contenant exactement N électrons. L'énergie virtuelle totale traversant un tel intervalle est donc simplement la somme des énergies virtuelles des propagateurs qu'il contient (*i. e.*, pour obtenir la *somme algébrique*, il est inutile de changer le signe des énergies virtuelles). Ainsi, quel que soit le pôle de l'élément de matrice (III.52) que l'on a obtenu à l'aide de la procédure graphique de la section IV/3.3-b, ce pôle est toujours dû à des propagateurs dont l'énergie virtuelle totale vaut

$$\sum_{i=1}^N z_i = E,$$

si bien que l'on peut toujours extraire explicitement ce pôle de l'élément de matrice partiel (*cf.* (IV.12)) qui l'a créé : (IV.19) peut donc en effet s'écrire

$$\prod_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i^- - z_i} = \frac{1}{E - \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon_i\right)} \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{-1} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{\varepsilon_i^- - z_i} \right). \quad (\text{IV.20})$$

(Nous avons pris, comme dans (IV.17), une limite semblable à (IV.18) afin d'obtenir le pôle en E .)

En résumé, j'ai montré que la procédure d'extraction explicite de pôles (IV.16) peut s'utiliser — une fois généralisée en (IV.20) — pour extraire *n'importe lequel* des pôles lus dans un diagramme (*cf.* section IV/3.3-b) et situé à l'énergie non perturbée d'un atome (*i. e.*, à la somme des énergies de Dirac des électrons le constituant). L'équation (IV.20) réalise ainsi concrètement l'étape (IV.8) de la méthode de la particule fantôme (*cf.* section IV/3.2).

IV/3.3-d \diamond Représentation graphique des calculs

Le remplacement de certains dénominateurs de la décomposition spectrale (IV.11a), par extraction explicite d'un pôle grâce à (IV.20), possède

plusieurs propriétés intéressantes. La première est que l'extraction (IV.20) est facile à représenter graphiquement : le gros des *calculs* de hamiltonien effectif par la méthode de la particule peut grâce à cela se réaliser par des diagrammes — qui permettent, à terme, d'effectuer explicitement les intégrations (IV.5) par la formule de Cauchy (IV.6).

Propagateur
fantôme

La structure de l'identité (IV.20) est simple : elle permet de transformer un produit de dénominateurs par une somme où ils sont successivement remplacés par (-1) . Si l'on effectue cette opération sur le dénominateur d'un électron n (état propre de Dirac), sa contribution au propagateur G (IV.11a) est donc modifiée par (IV.20) selon

$$\frac{\phi_n(\mathbf{x})\phi_n^\dagger(\mathbf{x}')}{\varepsilon_n - E} \rightarrow \frac{\phi_n(\mathbf{x})\phi_n^\dagger(\mathbf{x}')}{-1}. \quad (\text{IV.21})$$

La simplicité de cette transformation permet une représentation *graphique* de l'effet de la manipulation (IV.20) sur un diagramme comme (III.60). Je note dans les diagrammes tout (terme d'un) propagateur ainsi modifié par une *ligne pointillée*. Sur notre exemple de la self énergie écrantée, la transformation (IV.16) permet ainsi de représenter simplement le passage entre les formes (IV.9) et (IV.17) de l'élément de matrice de la fonction de Green :

$$(IV.9) = (IV.17)$$

peut s'écrire de manière beaucoup plus lisible :

$$= \frac{1}{E - (\varepsilon_{n'_{P'(1)}} + \varepsilon_{n'_{P'(2)}})} \left(\begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right). \quad (\text{IV.22})$$

Nous n'avons pas encombré cette formule par l'indication de tous les états individuels, $P(1)$, *etc.*, des électrons attachés au diagramme de self énergie écrantée que l'on étudie (III.59) — ces états ne sont jamais modifiés lors du calcul de l'élément de matrice (IV.9) qu'ils définissent ; mais ces états restent *implicites* et doivent être rétablis si besoin est.

Dimension
en énergie

Il est utile, pour faciliter les calculs, de vérifier les dimensions des quantités manipulées dans les dérivations graphiques. D'un point de vue mathématique, le remplacement (IV.21) d'un terme de propagateur électronique par un propagateur fantôme *ajoute un à la dimension en énergie* d'un diagramme. (Par exemple, l'Eq. (IV.22) illustre le lien entre les dimensions en énergie de différents diagrammes.)

Cette remarque, ajoutée au fait que les *éléments de matrice* (III.33) de la fonction de Green (III.9) possède la dimension de l'inverse d'une énergie¹, permet de vérifier l'*homogénéité* de presque tous les calculs menés avec la méthode de la particule fantôme (comme par exemple ceux que nous présentons dans le chapitre V). Nous rappelons que par définition des règles de Feynman des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108), un diagramme sans particule fantôme représente une contribution à un élément de matrice (III.33) : la dimension d'un tel diagramme est donc celle de l'inverse d'une énergie — qui est donc par exemple la dimension de (IV.22).

Ces deux remarques sur la dimension en énergie des diagrammes permettent en particulier de vérifier que les calculs de hamiltonien effectif effectués dans le chapitre V donnent de façon correcte des éléments de matrice de H_{eff} (III.39a) ayant les unités d'une énergie.

Symbole de sommation

D'une manière générale, lorsque l'on étudie un diagramme à N électrons, on obtient grâce à l'extraction de pôle (IV.20) une somme de N diagrammes où *chaque* (terme spectral de) propagateur impliqué dans le pôle est *successivement* remplacé par une ligne pointillée. Cette forme régulière de chacun des termes de (IV.20) rend donc pratique de n'utiliser qu'*un seul diagramme* pour représenter des *sommes* comme celle du deuxième membre de (IV.20) :

The diagram shows two diagrams in parentheses separated by a plus sign, followed by an equivalence symbol and a single diagram with a dotted line, all followed by a semicolon and the label (IV.23). The diagrams consist of two horizontal lines with arrows pointing right, connected by a wavy line representing an interaction. The first diagram has a solid line on top and a solid line on bottom. The second diagram has a solid line on top and a dotted line on bottom. The third diagram has a dotted line on top and a solid line on bottom.

la généralisation à plus de deux propagateurs du symbole de sommation (barré pointillé) du second membre est naturelle et peut être utilisée pour calculer de façon concise le hamiltonien effectif dans les atomes et ions à plus de deux électrons.

Notons enfin que les extractions successives de pôles avec (IV.23) peuvent demander d'utiliser *plusieurs* symboles de sommations (barrés pointillés) sur un même graphe : les propagateurs électroniques de *chaque* barré doivent être successivement remplacé par un propagateur fantôme. Par exemple :

The diagram shows a single diagram with two dotted lines on top and bottom, followed by an equivalence symbol and a sum of four diagrams in parentheses, all followed by a semicolon and the label (IV.24). The four diagrams represent the partial extraction of poles from the original diagram.

Nous profiterons de la concision apportée par les symboles de sommation (barrés pointillés) dans le chapitre V — et en particulier dans la section V/4.2, où nous utiliserons plusieurs symboles de sommation dans un même graphe.

¹Cela peut se voir par exemple dans le fait que la matrice P (III.39c) est sans dimensions (section III/4.2-b).

TAB. IV.1 – Règles de Feynman pour la méthode de la particule fantôme. Ces règles s’ajoutent à celles des tables III.1 et III.2 (cf. p. 108), dont nous reprenons les notations. Elles permettent de représenter certains *termes* des éléments de matrice (III.52) — cf. section IV/3.3-b — et de mener graphiquement des *calculs* d’extraction de pôles des éléments de matrice de la fonction de Green — cf. (IV.22). Les règles de « particule fantôme » se déduisent de celles de la p. 108, par sélection d’un état de Dirac n particulier et remplacement du dénominateur associé par (-1) . La notation « $z_{i,j}; n$ » indique la propagation d’un électron dans l’état n avec une énergie virtuelle $z_{i,j}$ (qu’il n’est pas toujours nécessaire de noter explicitement).

Propagateurs externes		
$P'(a) \cdots \xrightarrow{E'_{a,i}} \circ \mathbf{y}_i$	(Électron entrant)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE'_{i,a} \phi_{n_{P'(a)}}(\mathbf{y}_i) \frac{1}{-1}$
$\mathbf{y}_j \circ \cdots \xrightarrow{E_{j,a}} P(a)$	(Électron sortant)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE_{a,j} \frac{1}{-1} \phi_{n_{P(a)}}^\dagger(\mathbf{y}_j)$
$P'(a) \cdots \xrightarrow{E'_{a,a}} P(a)$	(Électron sans interaction)	$\frac{1}{2\pi i} \int dE'_{a,a} \delta_{n_{P'(a)}, n_{P(a)}} \frac{1}{-1}$
Propagateurs internes		
$\mathbf{y}_i \circ \xrightarrow{z_{i,j}; n} \circ \mathbf{y}_j$	(Électron interne)	$\frac{1}{2\pi i} \int dz_{i,j} \frac{\phi_n(\mathbf{y}_j) \phi_n^\dagger(\mathbf{y}_i)}{\varepsilon_n^- - z_{i,j}}$
$\mathbf{y}_i \circ \xrightarrow{z_{i,j}; n} \circ \mathbf{y}_j$	(Particule fantôme)	$\frac{1}{2\pi i} \int dz_{i,j} \frac{\phi_n(\mathbf{y}_j) \phi_n^\dagger(\mathbf{y}_i)}{-1}$

Règles de Feynman supplémentaires

La concision apportée par l’extraction mathématique d’un pôle sous la forme graphique (IV.22) est évidente. Mais aussi, le calcul graphique (IV.22) rend *superflue* l’écriture explicite (IV.9) de l’élément de matrice que définit la self énergie écrantée (III.59) : les intégrations (IV.6) menant aux matrices K et P (cf. section IV/2.3) se feront sur le *deuxième membre* de (IV.22), qui contient *explicitement* l’un des pôles du premier membre. J’introduis donc des *règles de Feynman supplémentaires*, qui donnent directement l’expression mathématique associée à chaque diagramme à *propagateur pointillé*, comme ceux de (IV.22).

Les diagrammes auxquels s’appliquent les règles de Feynman de base (cf. p. 108) sont étiquetés par des *énergies virtuelles* et par les *coordonnées* des points d’interaction — cf. (III.60). Le fait que les propriétés analytiques d’un diagramme soient en général spécifiques à chacun de ses termes *individuels* — cf. section IV/3.3-b — impose de définir nos nouvelles règles de Feynman pour des diagrammes où certains propagateurs (IV.11a) sont explicitement

restreints¹ à quelques états propres, en indiquant le ou les termes spectraux conservés (comme nous l'avons par exemple fait dans le diagramme (IV.13)). J'étends² ainsi les règles de Feynman traditionnelles (*cf.* p. 108) grâce à la table IV.1.

Les règles de Feynman de la table IV.1 sont donc une extension dans *deux* directions de celles données auparavant (*cf.* p. 108) : d'une part elles sont plus « fines » puisqu'elles permettent d'obtenir l'expression mathématique de certains *termes* des éléments de matrice (III.52) — *cf.* section IV/3.3-b. D'autre part — et surtout —, elles permettent de représenter le résultat de l'*extraction mathématique* (IV.20) de pôle, en remplaçant par l'intermédiaire du propagateur pointillé certains dénominateurs de G (IV.11a) par (-1) . Ainsi par exemple, les règles des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108) et IV.1 permettent de retrouver mathématiquement non seulement l'expression (IV.9) de la self énergie écrantée (III.60), mais aussi l'expression (IV.17) du deuxième membre de l'équation graphique (IV.22). Nous verrons dans le chapitre V qu'elles permettent de mener *graphiquement* l'ensemble des calculs des matrices K (III.39b) et P (III.39c), puis d'en obtenir *in fine* une expression mathématique — avec tous les avantages de dérivations graphiques et concises.

IV/3.3-e \diamond Propriétés analytiques et particule fantôme

Comme nous l'avons vu dans la section IV/3.3-b, les singularités des éléments de matrice (III.33) sont créées, pour chaque diagramme, par l'énergie totale des particules présentes dans certains *intervalles de temps* ; ces intervalles sont ceux compris entre les instants de propagation $t' = 0$ et Δt de (III.9) — voir le diagramme (IV.14). Comme la transformation de dénominateur (IV.21) concerne la fonction de Green $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ (IV.11a), il est nécessaire d'étudier réciproquement son influence sur la propagation *dans le temps*, *i. e.* sur le propagateur S_F (III.26a) qui sert à définir G (III.61a).

.....
 Particule
 fantôme

Voyons comment est modifiée la propagation (III.26a) *entre deux temps* par le remplacement d'un dénominateur de la fonction de Green de Dirac (IV.11a) par (-1) — remplacement suggéré par l'extraction explicite de pôle (IV.20). D'après la définition (III.61a), la fonction de Green de Dirac est

¹Notre exemple (IV.22) est particulier, de ce point de vue : il réalise l'extraction explicite d'un pôle créé par des propagateurs *entrants*, qui ont pour particularité d'être associés par les règles de Feynman à un *unique dénominateur*, défini par l'état propre individuel n'_1 ou n'_2 auquel il est connecté — *cf.* (IV.9). Il n'est donc pas nécessaire d'étiqueter les états associés aux propagateurs *externes*, comme dans (IV.22).

²Les *photons* ne donnent jamais de pôles dans le contour Γ_0 , si bien qu'il est inutile d'étudier séparément la contribution des différents états possibles pour les photons — *cf.* section IV/3.3-c. Dans le cadre de la méthode de la particule fantôme, nous n'avons donc pas besoin de règles de Feynman permettant de représenter des termes aussi généraux que (IV.12b) ou des diagrammes comme (IV.13) : il est seulement nécessaire de pouvoir isoler des états *électroniques* des propagateurs de Dirac (IV.11a).

reliée au propagateur (III.26a) par une transformée de Fourier entre temps et énergie :

$$S_F((t, \mathbf{x}); (t', \mathbf{x}')) = \frac{1}{2\pi i} \int dE e^{-iE(t-t')} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) \gamma^0. \quad (\text{IV.25a})$$

Le remplacement de dénominateur (IV.21) dans la représentation spectrale (IV.11a) donne un *nouveau propagateur* où la contribution de l'état n vaut, d'après (IV.25a)

$$\frac{1}{2\pi i} \int dE e^{-iE(t-t')} \frac{\phi_n(\mathbf{x}) \phi_n^\dagger(\mathbf{x}')}{-1} \gamma^0 = i\delta(t-t') \phi_n(\mathbf{x}) \bar{\phi}_n(\mathbf{x}'), \quad (\text{IV.25b})$$

où δ est la fonction delta de Dirac. En d'autres termes, remplacer par (-1) un dénominateur de la décomposition spectrale (IV.11a) donne au propagateur de Dirac S_F (III.26a) une contribution (IV.25b) où l'amplitude d'aller de t à t' est *nulle* si $t \neq t'$ — d'où le nom de « particule fantôme » que j'ai donné à cette méthode systématique de calcul du hamiltonien effectif (III.39a).

Lecture des pôles

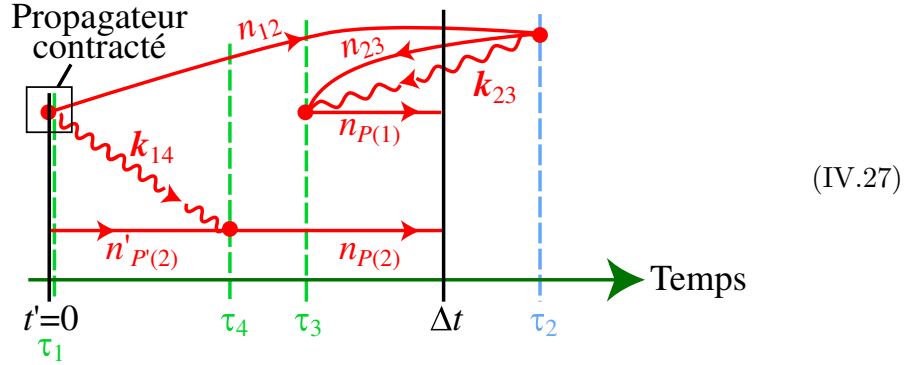
Cette propriété très simple du comportement en temps induit dans les propagateurs S_F nous permet de généraliser l'étude des propriétés analytiques de la fonction de Green que nous avons développée dans la section IV/3.3-b. Comme annoncé dans la section IV/3.2, les propriétés analytiques des diagrammes *avec particule fantôme* peuvent elles aussi se lire graphiquement. Pour connaître les propriétés analytiques de chacun des deux termes de l'élément de matrice (IV.17), il est en effet possible de suivre presque exactement la même procédure que celle présentée pour les diagrammes *sans particule fantôme* : il suffit de considérer tous les ordonnancements temporels possibles pour chacun de ces termes, sous la forme graphique qu'ils revêtent dans le second membre de (IV.22), et de contraindre tout propagateur fantôme (*i. e.* pointillé) à avoir ses extrémités ramenées au *même temps*. Je justifie précisément cette procédure simple, fondée essentiellement sur la propagation instantanée (IV.25b) de la particule fantôme, dans l'appendice C.

Afin d'illustrer cette méthode de lecture des pôles créés par les diagrammes à *particule fantôme*, retournons à l'exemple de la self énergie écrantée, à partir de la dernière expression que nous avons obtenue (IV.17). Pour lire les singularités du premier terme de (IV.17), que l'on a représenté (IV.22) grâce au diagramme



(IV.26)

il faut en particulier considérer l'ordonnancement temporel suivant :



où le propagateur fantôme entrant est contraint à être réduit à un *point*. Les pôles dus à cet ordonnancement temporel se lisent exactement comme dans les diagrammes sans particule fantôme, *i. e.* en comptabilisant les énergies de chaque intervalle entre deux interactions comprises entre $t' = 0$ et Δt — *cf.* section IV/3.3-b : la contribution (IV.26) à (IV.17) — *cf.* (IV.22) — contient (en particulier) trois pôles dus à l'ordonnancement temporel (IV.27) :

$$\mathcal{E}_2 = |\varepsilon_{n_{12}}| + \sqrt{\mathbf{k}_{14}^2 + \mu^2} + |\varepsilon_{n'_{P(2)}}| - i0 \quad 0 < t < \tau_4 \quad (\text{IV.28a})$$

$$\mathcal{E}_3 = |\varepsilon_{n_{12}}| + |\varepsilon_{n_{P(2)}}| - i0 \quad \tau_4 < t < \tau_3 \quad (\text{IV.28b})$$

$$\mathcal{E}_4 = |\varepsilon_{n_{12}}| + \sqrt{\mathbf{k}_{23}^2 + \mu^2} + |\varepsilon_{n_{23}}| + |\varepsilon_{n_{P(1)}}| + |\varepsilon_{n_{P(2)}}| - i0 \quad \tau_3 < t < \Delta t \quad (\text{IV.28c})$$

(Nous avons repris les notations des pôles (IV.15) dus à l'ordonnancement (IV.14).)

Ainsi, la représentation graphique (IV.22) ne sert pas seulement à écrire de manière simple l'extraction explicite de pôles (IV.20) : elle permet *aussi* la lecture des pôles de chaque terme obtenu grâce à (IV.20), et ce d'une manière tout aussi simple que pour un diagramme sans particule fantôme (section IV/3.3-b).

Extraction
des pôles

Comme pour les diagrammes sans particule fantôme, une fois un pôle de l'élément de matrice (III.52) lu sur un ordonnancement temporel, il est nécessaire de l'extraire explicitement de la contribution *mathématique* donnée par les règles de Feynman. Comme les propagateurs fantômes sont réduits à des points dans les diagrammes temporels — *cf.* (IV.27) —, ils ne participent jamais aux N propagations électroniques responsables d'un pôle en E (*cf.* section IV/3.3-c). L'expression mathématique d'un diagramme

avec particule fantôme se déduisant simplement par remplacement de certains dénominateurs de G (IV.11a) par (-1) (voir pages 108 et 149), l'extraction de pôles présentée dans la section IV/3.3-c s'applique intégralement aux diagrammes à propagateurs pointillés. Il suffit ainsi d'appliquer la formule (IV.20) sur les N propagations responsables d'un pôle pour exhiber la singularité en E lue sur un ordonnancement temporel.

Par exemple, d'après la section IV/3.3-c, l'unique singularité (IV.28) due à (IV.27) et susceptible de donner un pôle dans le contour non perturbé Γ_0 est $\mathcal{E}_3 = |\varepsilon_{n_{12}}| + |\varepsilon_{n_{P(2)}}| - i0$. Prenons le cas où l'état de Dirac n_{12} coïncide¹ avec celui de l'électron sortant $n_{P(1)}$: le pôle \mathcal{E}_3 est alors situé à l'énergie (non perturbée) $\varepsilon_{n_{P(1)}} + \varepsilon_{n_{P(2)}}$ de l'état $|\mathbf{n}_0\rangle$ — qui sert à définir l'élément de matrice (IV.9). Pour extraire explicitement ce pôle, nous pouvons utiliser la formule (IV.20), exactement comme dans la section IV/3.3-c : d'après cette formule et le graphique (IV.27), les dénominateurs des propagations de l'intervalle de temps $[\tau_4, \tau_3]$ font apparaître ce pôle de (IV.17) selon (avec $n_{12} = n_{P(1)}$)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{[\varepsilon_{\bar{n}_{P(1)}} - E_{31}]} \frac{1}{[\varepsilon_{\bar{n}_{P(2)}} - (E - E_{31})]} \\ &= \frac{1}{E - (\varepsilon_{n_{P(1)}} + \varepsilon_{n_{P(2)}})} \left[\frac{1}{(-1) [\varepsilon_{\bar{n}_{P(2)}} - (E - E_{31})]} + \frac{1}{[\varepsilon_{\bar{n}_{P(1)}} - E_{31}] (-1)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{IV.29})$$

Plutôt que d'appliquer cette transformation au premier terme de l'élément de matrice (IV.17), nous pouvons profiter des diagrammes avec particule fantôme et états explicites : d'après (IV.13), le premier terme de (IV.22) contient une contribution où l'on a sélectionné le terme spectral $n_{12} = n_{P(1)}$ du propagateur intermédiaire :



$$, \quad (\text{IV.30})$$

où le propagateur étiqueté indique que seul le terme $n_{P(1)}$ doit être conservé dans la fonction de Green intermédiaire G (IV.11a). (Nous rappelons que l'état propre de Dirac caractérisant chaque électron externe est implicitement celui du diagramme (III.59) que nous étudions, si bien que nous n'avons pas noté, dans (IV.30), l'état de Dirac affecté aux propagateurs entrants et sortants.) L'extraction explicite (IV.29) du pôle en $E = \mathcal{E}_3$ (IV.28b) de (IV.30) peut se représenter graphiquement grâce aux règles de Feynman

¹Nous rappelons que l'élément de matrice (IV.12a) contient une *somme* sur tous les états de Dirac n_{12} possibles.

de la table IV.1, p. 149 :

$$= \frac{1}{E - (\epsilon_{n_{P(1)}} + \epsilon_{n_{P(2)}})} \left(\begin{array}{c} \dots \\ \dots \end{array} + \begin{array}{c} \dots \\ \dots \end{array} \right). \quad (\text{IV.31})$$

Avec ou sans particule fantôme, l'extraction explicite des pôles lus dans les ordonnancements temporels s'effectue donc toujours de la manière décrite dans la section IV/3.3-c : grâce à la formule (IV.20), qui peut se représenter graphiquement et de manière concise.

.....
Itérations

L'extraction de pôles contenus dans des diagrammes avec particule fantôme peut se poursuivre ainsi jusqu'à épuisement des singularités (en nombre fini) de l'élément de matrice étudié — (IV.9), pour notre exemple — : on cherche graphiquement les N propagations électroniques impliquées dans un pôle de Γ_0 , puis on fait apparaître explicitement celui-ci grâce à (IV.20), que l'on peut représenter graphiquement — *cf.* (IV.22) et (IV.31). Au cours des itérations de cette procédure, les ordonnancements temporels à considérer pour lire les singularités des différents termes contiennent d'ailleurs de plus en plus de particules fantômes, et donc de moins en moins de propagateurs électroniques, donc d'intervalles de temps et de pôles.

Pour être complet dans notre description de la méthode de la particule fantôme, il nous faut mentionner un cas très particulier d'ordonnement temporel que l'on est parfois amené à considérer. Il est possible d'aboutir à un diagramme dont l'une des « lignes électroniques »¹ est constituée *uniquement* de particules fantômes. Dans ce cas, l'étude graphique des singularités impose contracter toutes les propagations fantôme en un seul point, en ramenant à un *unique* temps l'instant t' dont part cette ligne, ceux auxquels se produisent les interactions qu'elle contient, ainsi que le temps Δt auquel elle se termine : on obtient un diagramme d'ordonnement temporel où $t' = \Delta t$. Dans ces conditions, il n'y a donc *aucun intervalle* de temps entre t' et Δt , si bien que le diagramme particulier dont on cherche les singularités n'en possède *aucune*². Nous rencontrerons cette situation dans les calculs de hamiltonien effectif du chapitre V — *cf.* section V/4.3.

¹Nous entendons par là une ligne complète d'électrons du diagramme original (sans particule fantôme), depuis l'entrée jusqu'à la sortie du diagramme, comme les lignes horizontales des diagrammes de (IV.31).

²Ce résultat, conforme à la procédure développée dans la section IV/3.3-b, est explicitement démontré dans l'appendice C, où nous étudions mathématiquement les propriétés analytiques des diagrammes.

Conclusion

Théorie des
perturba-
tions d'une
fonction
singulière

Nous avons vu dans ce chapitre et dans l'appendice B qu'intégration de contour et développement perturbatif *ne commutent pas* pour une fonction méromorphe dont la position des singularités dépend du paramètre perturbatif. Ce résultat rend nécessaire de corriger les contours d'intégration proposés pour la méthode de la fonction de Green à deux temps (*cf.* section IV/2), ce que j'ai fait dans la section IV/2.2 (grâce aux résultats de l'appendice B).

En résumé, j'ai obtenu le résultat mathématique suivant : il est possible de calculer perturbativement les intégrations calculées sur des contours entourant les pôles de la fonction méromorphe exacte, à *condition* de les remplacer par des intégrations autour des pôles *non perturbés* (*i. e.* de la fonction méromorphe étudiée pour une valeur nulle de son paramètre); la formule (IV.4) décrit précisément ce résultat (voir l'appendice B pour une preuve). La formule (IV.4) justifie les calculs perturbatifs de niveaux d'énergie par la méthode de la fonction de Green à deux temps et résout les problèmes laissés ouverts par les présentations publiées de la méthode (*cf.* section III/6).

Méthode de
la particule
fantôme

J'ai d'autre part présenté dans la section IV/3 une méthode *systématique* et *graphique* qui sert à effectuer explicitement l'ensemble des intégrations de contour qui donnent le hamiltonien effectif — *cf.* (III.39). Cette méthode « de la particule fantôme » permet d'extraire *systématiquement* toutes les singularités des éléments de matrice (III.52) de la fonction de Green (III.10). Nous avons détaillé successivement les points esquissés dans la section IV/3.2 : toutes les singularités contenues dans le contour Γ_0 peuvent être progressivement extraites par lecture de diagrammes ordonnés en temps — comme par exemple (IV.27) — puis manipulation graphique de diagrammes impliquant des propagateurs fantômes — comme par exemple (IV.31). À la fin de ce processus, la contribution du diagramme de Feynman étudié à la fonction de Green (III.10) est mise sous une forme (B.5) dont les singularités sont explicites; ceci permet de facilement de l'intégrer sur un contour et, *in fine*, d'obtenir explicitement sa contribution au hamiltonien effectif H_{eff} (III.39a).

Nous avons pris l'exemple de la self énergie écrantée (III.59), dont la

contribution obtenue par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) ne possède pas une structure analytique évidente — *cf.* (IV.9). Grâce aux règles de Feynman supplémentaires introduites p. 149 et aux procédures *systematiques* de lecture et d'extraction de pôles décrites dans cette section, nous avons pu amorcer l'étude des singularités du diagramme de self énergie écrantée, que je complète dans le chapitre suivant (V).

Les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps cités jusqu'ici utilisent pour ce faire des méthodes formelles apparemment adaptées de façon *ad hoc* à chaque diagramme (voir par exemple ARTEMYEV *et al.* [2000] et SHABAEV [2000] ou SHABAEV [2002]), et où les dérivations ne sont pas toujours justifiées explicitement (voir par exemple SHABAEV and FOKEEVA [1994]). La contribution de tout diagramme au hamiltonien effectif (III.39a) est rendue systématiquement calculable par la méthode de la particule fantôme présentée dans ce chapitre — après usage de la formule de Cauchy (IV.6) pour obtenir les matrices K (IV.5a) et P (IV.5b).

Afin de rendre les méthodes de la fonction de Green à deux temps et de la particule fantôme utilisables dans des calculs concrets de la contribution de certains diagrammes aux niveaux d'énergie atomiques, je présente dans le chapitre suivant un exemple complet (et non trivial) de calcul de contribution au hamiltonien effectif d'un ensemble de niveaux dégénérés ou quasi-dégénérés.

CHAPITRE V

Exemple de contribution au hamiltonien effectif : la self-énergie écrantée

Sommaire

V/1	Présentation des calculs	159
V/1.1	Présentation	159
V/1.2	Diagrammes considérés	161
V/1.3	Étapes du calcul	162
V/2	Hamiltonien au second ordre	163
V/2.1	Simplification du hamiltonien pour un niveau isolé	163
V/2.2	Simplification du hamiltonien au second ordre	164
V/2.2-a	Matrice $K^{(0)}$	164
V/2.2-b	Contribution des diagrammes à deux photons	164
V/2.2-c	Notations pour les intégrations	165
V/2.2-d	Contribution des diagrammes à un photon	166
V/2.2-e	Hamiltonien au second ordre	167
V/2.3	Intégrales de contour	168
V/2.3-a	Intégration pour un diagramme spécifique	168
V/2.3-b	Intégrales de diagrammes à deux photons	168
V/2.3-c	Intégrales de diagrammes à un photon	169
V/2.3-d	Conclusion	170
V/3	Intégrations entre états non dégénérés	171
V/3.1	Introduction et notations	171
V/3.1-a	Énergies différentes	171
V/3.1-b	Notation pour les éléments de matrice	171
V/3.1-c	Groupes de contours	172
V/3.1-d	Organisation des calculs	173
V/3.2	Échange de photon	173
V/3.2-a	Lecture des singularités	173
V/3.2-b	Extraction des pôles	174
V/3.2-c	Contributions au hamiltonien effectif	175

CHAPITRE V. EXEMPLE DE CONTRIBUTION AU HAMILTONIEN EFFECTIF...

V/3.3 Self énergie	176
V/3.3-a Règles de sélection	176
V/3.3-b Choix de niveaux quasi-dégénérés	177
V/3.3-c Application au hamiltonien effectif	178
V/3.4 Vertex	178
V/3.4-a Lecture des pôles	178
V/3.4-b Extraction des pôles	179
V/3.4-c Contributions au hamiltonien effectif	179
V/3.5 Self énergie écrantée	180
V/3.5-a Diagrammes réductibles et irréductibles	180
V/3.5-b Contribution irréductible	181
V/3.5-c Contribution réductible	184
V/3.6 Conclusion	188
V/4 Intégrations entre états quelconques	189
V/4.1 Introduction	189
V/4.1-a Limite formelle	189
V/4.1-b Particule fantôme et divergences	190
V/4.1-c Plan	190
V/4.2 Échange de photon	191
V/4.3 Self énergie	193
V/4.3-a Structure analytique	194
V/4.3-b Contributions au hamiltonien effectif	195
V/4.3-c Conclusion	196
V/4.4 Vertex	196
V/4.5 Self énergie écrantée	196
V/4.5-a Contribution irréductible	197
V/4.5-b Contribution réductible	197
V/5 Contribution de la self énergie écrantée...	201
V/5.1 Résultats graphiques finals	201
V/5.1-a Diagrammes à deux photons	201
V/5.1-b Diagrammes à un photon	202
V/5.2 Résultats pour les diagrammes à un photon	203
V/5.2-a Opérateurs élémentaires	204
V/5.2-b Diagrammes sans particule fantôme	205
V/5.2-c Diagrammes avec particule fantôme	207
V/5.2-d Expression mathématique	208
V/5.2-e Énergies virtuelles fixées	209
V/5.2-f Résultat final	212
V/5.3 Résultats pour les diagrammes à deux photons	213
V/5.3-a Diagrammes sans particule fantôme	213
V/5.3-b Expression mathématique	214
V/6 Conclusion	217
V/6.1 Ensemble des résultats	217
V/6.2 Perspectives	218

Présentation des calculs

V/1.1

Présentation

Afin d'illustrer la méthode de la fonction de Green à deux temps du chapitre III et la technique de la particule fantôme du chapitre IV, il est utile de donner les détails d'un calcul complet d'une contribution particulière au hamiltonien effectif (III.39a). Nous avons choisi la self énergie écrantée — donnée dans les diagrammes (V.1) ci-dessous —, dont nous avons publié récemment [LE BIGOT *et al.* 2001b] la contribution au hamiltonien effectif $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c). La self énergie écrantée (V.1) représente une correction (due au processus de self énergie) à l'interaction électromagnétique entre électrons.

.....
Précision
expérimentale

Cette contribution est importante car nombre de prédictions théoriques de la structure fine de l'hélium et des ions héliumoïdes sont moins précises que les expériences. Dans l'espace des dix dernières années, les mesures spectroscopiques sur l'hélium [GEORGE *et al.* 2001 ; STORRY *et al.* 2000 ; STORRY and HESSELS 1998 ; DORRER *et al.* 1997 ; EIKEMA *et al.* 1997 ; MARIN *et al.* 1994 ; LICHTEN *et al.* 1991 ; SANSONETTI *et al.* 1990] ont atteint des précisions qui devancent de deux ordres de grandeur les meilleures évaluations théoriques des niveaux d'énergie (voir par exemple DRAKE and MARTIN [1998] ; DRAKE and GOLDMAN [2000] et les références qui y sont contenues). Plusieurs expériences sont en cours sur la structure fine des niveaux $1s2p^3P_J$ de l'hélium et des ions héliumoïdes [GEORGE *et al.* 2001 ; MINARDI *et al.* 1999 ; STORRY *et al.* 2000 ; CASTILLEGUA *et al.* 2000 ; MYERS *et al.* 1999 ; MYERS and TARBUTT 2000], avec pour but une nouvelle détermination de la constante de structure fine α [GEORGE *et al.* 2001]. Dans ce contexte, il est nécessaire d'obtenir pour la structure fine de l'hélium et des ions héliumoïdes une détermination non perturbative (en l'interaction électron noyau, *cf.* section I/4.2) de toutes les contributions des diagrammes à *deux* photons.

.....
États quasi-
dégénérés

L'une des difficultés auxquelles se heurte la prédiction de la structure fine des ions héliumoïdes provient du fait que leurs niveaux $(1s2p_{1/2})_{J=1}$ et $(1s2p_{3/2})_{J=1}$ sont *quasi-dégénérés* (*i. e.* d'énergies non perturbées proches par rapport à la correction en énergie due à la perturbation) lorsque les deux électrons subissent une charge faible ou moyenne [ARTEMYEV *et al.* 2000] — voir aussi la note 1, p. 30. En conséquence, il n'est pas possible¹

¹Cette limitation de la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher a originellement motivé notre étude de la méthode de la fonction de Green à deux temps proposée dans SHABAEV

d'utiliser la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher (*cf.* section II/2.1) pour obtenir une expression analytique représentant le déplacement en énergie prédit par QED pour ces niveaux.

.....

Évaluations numériques à deux photons Des déplacements dûs à self énergie écrantée¹ (V.1) ont récemment été évalués de façon numérique pour des niveaux *isolés* : de façon partielle [INDELICATO and MOHR 1991 ; BLUNDELL 1993 ; LINDGREN *et al.* 1993a ; CHEN *et al.* 1995 ; INDELICATO and MOHR 1998a, 2001]², de façon complète pour le *fondamental* des ions héliumoïdes [PERSSON *et al.* 1996 ; YEROKHIN *et al.* 1997 ; SUNNERGREN 1998], ainsi que pour les états $2s$ et $2p_{1/2}$ des ions lithiumoïdes [YEROKHIN *et al.* 1998, 1999a].

.....

Plan Je dérive dans ce chapitre des formules pour la contribution de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) — *i. e.* au hamiltonien effectif au second ordre. Vladimir Shabaev a obtenu de façon indépendante les mêmes formules [LE BIGOT *et al.* 2001b].

Bien que je traite le cas particulier de la self énergie écrantée, je donne tout au long de la dérivation qui suit des principes calculatoires généraux qui devraient permettre d'obtenir systématiquement des formules pour la contribution de n'importe quel diagramme au hamiltonien effectif H_{eff} (III.39a).

Arriver à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ demande tout d'abord de recenser les contributions des diagrammes étudiés à la formule (III.51c) de définition de $H_{\text{eff}}^{(2)}$, ce que je fais dans la section V/2.3. Ensuite, il est nécessaire de calculer des intégrales de contour — *cf.* (IV.5). En utilisant la méthode systématique de la particule fantôme, j'obtiens *graphiquement* le résultat de ces intégrations dans les sections V/3 et V/4. Il ne reste alors plus qu'à utiliser les règles de Feynman de la méthode de la particule fantôme pour aboutir à une *expression formelle* pour la contribution de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif, ce que je fais dans la section V/5 — où je montre aussi comment extraire des formules physiquement simples des résultats bruts donnés par les règles de Feynman. Les formules obtenues peuvent former la base d'un calcul numérique de la contribution de la self énergie écrantée à la structure fine de l'hélium et des héliumoïdes.

[1988b, 1990a].

¹Les deux autres corrections à deux photons à l'interaction entre deux électrons ont été calculées (sans approximations) pour des états *isolés*, dans les ions à deux ou trois électrons : la polarisation du vide écrantée [PERSSON *et al.* 1996 ; ARTEMYEV *et al.* 1997 ; SUNNERGREN 1998 ; ARTEMYEV *et al.* 1999, 2000] et l'échange de deux photons [BLUNDELL *et al.* 1993 ; LINDGREN *et al.* 1995 ; MOHR and SAPIRSTEIN 2000 ; YEROKHIN *et al.* 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001]. Voir aussi la section I/4.4-c.

²La référence INDELICATO and MOHR [2001] utilise une méthode applicable à des ions possédant *jusqu'à 10 électrons* occupant les niveaux $n = 1$ ou $n = 2$.

V/1.2

Diagrammes considérés

Diagrammes
à deux
photons

La contribution de self énergie écrantée (qui représente la correction de la self énergie à l'interaction entre deux électrons), que je calcule dans ce chapitre, correspond aux diagrammes suivants :

$$\begin{array}{cc}
 P'(1) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(1) & P'(1) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(1) \\
 P'(2) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(2) & P'(2) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(2)
 \end{array} \quad (V.1a)$$

et

$$\begin{array}{cc}
 P'(1) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(1) & \\
 P'(2) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \Rightarrow P(2) &
 \end{array} \quad (V.1b)$$

Tous ces diagrammes représentent une self énergie qui modifie l'échange d'un photon entre deux électrons. Les permutations P et P' de $\{1, 2\}$ contenues dans ces diagrammes représentent toujours les permutations possibles des électrons entrants et sortants¹. Les processus perturbatifs (V.1) sont suffisamment complexes pour permettre d'illustrer *dans leur généralité* les méthodes de calcul du hamiltonien effectif (III.39a) par la méthode de la particule fantôme (*cf.* section IV/3).

Les diagrammes (V.1) contribuent au hamiltonien effectif (III.50) à partir du second ordre : ils contiennent chacun deux photons et doivent donc être inclus dans le calcul de $K^{(2)}$ et de $P^{(2)}$ et, partant, de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ — *cf.* (III.49) et (III.51). La contribution des diagrammes (V.1) au second ordre du hamiltonien effectif est donc contenue dans la matrice $s \times s$

$$K^{(2)} - \frac{1}{2}\{P^{(2)}, K^{(0)}\}, \quad (V.2a)$$

d'après (III.51c).

Diagrammes
à un photon

Mais le hamiltonien effectif au second ordre (III.51c) contient aussi les matrices K (III.39b) et P (III.39c) au *premier* ordre au travers des termes

$$-\frac{1}{2}\{P^{(1)}, K^{(1)}\} + \frac{3}{8}\{P^{(1)2}, K^{(0)}\} + \frac{1}{4}P^{(1)}K^{(0)}P^{(1)}. \quad (V.2b)$$

¹Nous rappelons que lorsque l'on calcule un élément de matrice (III.33) de la fonction de Green, les états entre lesquels il est défini forment les états entrant et sortant de chacun des termes perturbatifs représentés par des diagrammes de Feynman — *cf.* section III/5.2-c, p. 105.

(Au total, d'après (III.51c), $H_{\text{eff}}^{(2)} = (V.2a) + (V.2b)$.)

Il est donc important de calculer aussi des *produits de contributions au premier ordre* lorsque l'on cherche à obtenir le hamiltonien au second ordre¹ [ARTEMYEV *et al.* 2000 ; LE BIGOT *et al.* 2001b]. La forme des diagrammes (V.1) nous invite donc à calculer aussi les contributions à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ dues aux diagrammes²

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \\ P(2) \end{array} \quad \text{et} \quad \begin{array}{c} P'(1) \\ \\ P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \\ P(2) \end{array} \quad (V.3)$$

(Le diagramme de self énergie ci-dessus contient *deux* lignes d'électrons car les matrices K (III.39b) et P (III.39c) qui servent à construire le hamiltonien effectif (III.39a) sont définies entre les états quasi-dégénérés auxquels nous nous intéressons — états qui comportent deux électrons.) Dans ce chapitre, je calcule donc aussi la contribution des diagrammes (V.3) aux termes (V.2b) du hamiltonien effectif (III.51c) ; comme on peut s'y attendre, cette contribution mathématique pourra être combinée de façon naturelle avec celle due aux diagrammes (V.1a).

V/1.3

Étapes du calcul

.....

Simplification du hamiltonien au second ordre	Les deux parties de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) que nous venons de discuter — (V.2a) et (V.2b) — se prêtent à simplification : il est possible de les exprimer sous une forme où certains pôles des éléments de matrice (III.52) sont <i>compensés</i> . Cela nous permettra d'utiliser la formule de Cauchy (IV.6) sur des ordres moins élevés que si nous calculions directement $H_{\text{eff}}^{(2)}$ à partir de son expression (III.51c). Cette simplification de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ est donnée dans la section V/2.2.
-----------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

.....

Calcul des intégrales de contour	La méthode de la particule fantôme présentée dans la section IV/3 permet d'effectuer (de façon perturbative) les <i>intégrations de contour</i> nécessaires à la définition (III.39) du hamiltonien effectif — voir la section IV/2 pour le lien entre intégrations de contour et développements perturbatifs. Nous présentons le résultat de ces intégrations dans les section V/3 et V/4.
----------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

¹On trouve un mécanisme similaire dans la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher pour le calcul des niveaux atomiques isolés — voir les références citées dans la section II/2.1.

²Grâce à sa symétrie, le diagramme d'échange de photon entre les deux électrons ne nécessite qu'une seule permutation P , qui détermine s'il y a ou non échange des électrons sortants — *cf.* section III/5.2-c.

Simplification
des formules
brutes

Cependant, les expressions mathématiques « brutes » que l'on obtient ainsi — au travers de la formule de Cauchy (IV.6) — gagnent à être *simplifiées*. Nous montrons dans la section V/5 que la méthode de la particule fantôme est aussi adaptée à cette tâche, qu'elle peut accomplir de manière *systématique* : nous l'utiliserons pour simplifier les expressions obtenues pour les éléments de matrice du hamiltonien effectif (III.39a).

Les calculs qui suivent montrent que l'utilisation des méthode de la fonction de Green et de la particule fantôme est en pratique relativement simple (même si les calculs que je présente dans ce chapitre sont relativement longs), en particulier par rapport aux développements théoriques qui précèdent (chapitre III et section IV/1–IV/3).

SECTION 2 (Chapitre V)

Hamiltonien au second ordre

Avant de commencer, dans la section V/3, des calculs spécifiquement liés au cas de la self énergie écrantée, il est utile de montrer que les termes (V.2) de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ peuvent être simplifiés de façon *générale*.

V/2.1

Simplification du hamiltonien pour un niveau isolé

Le calcul du hamiltonien effectif au second ordre $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) passe en théorie par celui des matrices K et P (aux ordres zéro à deux), que l'on multiplie *ensuite* entre elles dans différents termes (V.2). Cependant le calcul du déplacement en énergie pour un niveau *isolé* montre que l'on peut espérer mener les calculs de façon *simplifiée*. Pour le voir, nous reprenons les notations de la section III/4.2-a sur la définition du hamiltonien effectif et de la section IV/1.2. Si l'on étudie l'énergie de $s = 1$ état, le hamiltonien effectif est une matrice 1×1 qui vaut, d'après les définitions (III.39),

$$H_{\text{eff}} = \frac{K}{P} = \frac{\oint_{\Gamma} dE E \times \langle \mathbf{n}_0^1 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^1 \rangle}{\oint_{\Gamma} dE \langle \mathbf{n}_0^1 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^1 \rangle}. \quad (\text{V.4})$$

(où nous avons utilisé le fait que les matrices K (III.39b) et P (III.39c) sont de dimension 1×1). En conséquence, le déplacement du niveau $|\mathbf{n}_0^1\rangle$ dû à

V/2. Hamiltonien au second ordre

l'électrodynamique quantique des états liés vaut

$$H_{\text{eff}} - E_{\mathbf{n}_1}^{(0)} = \frac{\oint_{\Gamma} dE (E - E_{\mathbf{n}_1}^{(0)}) \times \langle \mathbf{n}_0^1 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^1 \rangle}{\oint_{\Gamma} dE \langle \mathbf{n}_0^1 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^1 \rangle}, \quad (\text{V.5})$$

où $E_{\mathbf{n}_1}^{(0)}$ est l'énergie non perturbée de l'état $|\mathbf{n}_0^1\rangle$ étudié (c'est la somme des énergies de Dirac des électrons qu'il contient — *cf.* Eq. (II.12)). On voit dans la formule (V.5) que les pôles en $E = E_{\mathbf{n}_1}^{(0)}$ contenus dans le développement perturbatif de l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^1 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^1 \rangle$ sont partiellement compensés *avant* l'intégration de contour¹ : le calcul du déplacement en énergie du niveau $|\mathbf{n}_0^1\rangle$ est donc plus simple sous la forme (V.5) que sous la forme (V.4).

V/2.2

Simplification du hamiltonien au second ordre

V/2.2-a \diamond Matrice $K^{(0)}$

Nous pouvons faire apparaître le même mécanisme simplificateur dans le calcul de la *matrice* $s \times s$ $H_{\text{eff}}^{(2)}$. Il suffit pour cela d'utiliser le fait qu'à l'ordre zéro (en la constante de couplage α) la matrice K est diagonale et donne les énergies non perturbées [SHABAEV 1993] :

$$K_{ij}^{(0)} = \delta_{i,j} E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \quad (\text{V.6})$$

— ce qui est cohérent avec le hamiltonien effectif (III.51a) à l'ordre zéro et peut se voir par exemple grâce à l'Eq. (III.43). En reportant (V.6) dans les termes (V.2) de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) et en regroupant les termes de manière adéquate, on peut généraliser (V.5) à des matrices (au moins à l'ordre deux en α).

V/2.2-b \diamond Contribution des diagrammes à deux photons

Commençons par la contribution à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ des diagrammes à deux photons : les termes (V.2a) peuvent être mis sous la forme explicite

$$(V.2a)_{ij} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE \frac{1}{2} [(E - E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}) + (E - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})] \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(2)}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (\text{V.7})$$

¹Nous rappelons que la section IV/2 contient une étude générale du lien entre singularités et développement perturbatif, et que la section IV/3 décrit comment extraire explicitement ces singularités dans le cas particulier des éléments de matrice (III.52) de la fonction de Green.

où (i, j) sont les coordonnées de l'élément de matrice calculé ; pour obtenir (V.7), nous avons simplement utilisé dans (V.2a) les formes explicites (IV.5) et (V.6) des matrices $K^{(2)}$, $P^{(2)}$ et $K^{(0)}$.

La forme (V.7) représente une *simplification* par rapport à (V.2a), car l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(2)}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ possède toujours un pôle en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, comme nous l'avons vu p. 140, lors de l'analyse graphique des singularités des diagrammes. En conséquence, les facteurs $(E - E_{\mathbf{n}^i}^{(0)})$ et $(E - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})$ que nous avons fait apparaître dans (V.7) *compensent explicitement* des pôles de la fonction de Green et rendent ainsi les calculs plus directs que si l'on avait calculé séparément les matrices $K^{(2)}$ et $P^{(2)}$ de (V.2a).

V/2.2-c \diamond **Notations pour les intégrations**

.....
Symbole
d'intégration
de contour

Pour obtenir le hamiltonien effectif (III.50), il est en général nécessaire de calculer plusieurs intégrales de contour semblables à celle de (V.7) : elles sont contenues dans les matrices K et P (IV.5), et donc dans les formes simplifiées — comme (V.7) — que l'on peut obtenir pour le hamiltonien effectif (III.50). Afin de pouvoir écrire simplement les quantités que nous devons calculer, nous introduisons une *notation* condensée pour les intégrales de contour : pour une fonction $f(E)$ quelconque, nous définissons les matrices $s \times s$ suivantes ($i, j = 1, \dots, s$) :

$$\mathcal{I}_{ij}^{(k)}[f(E)] \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE f(E) \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle ; \quad (\text{V.8})$$

ainsi, le symbole « \mathcal{I} » est un opérateur qui réalise l'intégration sur le contour Γ_0 des fonctions $E \mapsto f(E) \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ — qui sont construites à partir des éléments de matrice (III.52) de la fonction de Green. Par exemple, grâce à cette notation générique, les termes perturbatifs des matrices K (IV.5a) et P (IV.5b) s'écrivent de façon unifiée

$$K^{(k)} = \mathcal{I}^{(k)}[E] \quad \text{et} \quad P^{(k)} = \mathcal{I}^{(k)}[1]$$

(où nous avons repris les notations (III.49) pour les termes perturbatifs).

.....
Distances
aux pôles

Comme l'on cherche à supprimer des pôles en introduisant des facteurs de la forme $E - E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ (où $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ est l'une des s énergies non perturbées des états étudiés) devant les éléments de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{(k)}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$, il est aussi utile d'introduire une notation pour les distances aux énergies non perturbées :

$$\Delta E_i \equiv E - E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}. \quad (\text{V.9})$$

Ainsi par exemple, la simplification (V.7) peut s'écrire, grâce aux notations (V.8) et (V.9), comme

$$\begin{aligned} (V.7) &= \mathcal{I}_{ij}^{(2)} \left[\frac{1}{2} (\Delta E_i + \Delta E_j) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left(\mathcal{I}_{ij}^{(2)} [\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij}^{(2)} [\Delta E_j] \right) ; \end{aligned} \quad (V.10)$$

la présence de deux fois le même indice (i ou j) dans chacun des deux termes indique de façon formelle que le calcul de (V.10) est simplifié grâce à la compensation (partielle) de l'un des pôles dûs aux états entre lesquels la fonction de Green est calculée.

Notons que la formule (V.10) pour l'élément de matrice $(H_{\text{eff}}^{(2)})_{ij}$ se simplifie beaucoup lorsque l'on étudie un niveau isolé — ce qui est le seul cas, rappelons-le, auquel la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher peut être appliquée (*cf.* section II/2.1). Dans cette situation où l'on ne s'intéresse qu'à l'énergie de $s = 1$ niveau, la méthode de la fonction de Green à deux temps indique grâce à (V.10) que

$$(V.2a) = \mathcal{I}_{11}^{(2)} [\Delta E_1], \quad (V.11)$$

où nous avons simplement utilisé le fait que les matrices manipulées ont dans ce cas un unique élément ($i = j = 1$) — nous rappelons que (V.2a) est la contribution des diagrammes à deux photons à $H_{\text{eff}}^{(2)}$. Ainsi, le déplacement (au second ordre) dû à diagramme à deux photons se calcule pour un niveau isolé par *une seule intégrale* de contour \mathcal{I} (V.8); ceci montre l'intérêt pratique qu'il y a à utiliser la méthode de la fonction de Green à deux temps dans la dérivation d'expressions pour les énergies atomiques.

V/2.2-d \diamond Contribution des diagrammes à un photon

Simplifier par compensation de pôles la contribution (V.2b) des diagrammes à un photon est plus difficile. On peut y parvenir en utilisant à nouveau la forme explicite (V.6) de la matrice $K^{(0)}$ et les formules d'intégration (IV.5) des matrices K et P : on peut ainsi obtenir la forme simplifiée suivante pour l'élément de matrice (i, j) de (V.2b)

$$\begin{aligned} (V.2b)_{ij} &= \sum_{l=1}^s \left\{ -\frac{3}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{(1)} [1] \mathcal{I}_{lj}^{(1)} [\Delta E_j] + \mathcal{I}_{il}^{(1)} [\Delta E_i] \mathcal{I}_{lj}^{(1)} [1] \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{(1)} [1] \mathcal{I}_{lj}^{(1)} [\Delta E_l] + \mathcal{I}_{il}^{(1)} [\Delta E_l] \mathcal{I}_{lj}^{(1)} [1] \right) \right\}, \end{aligned} \quad (V.12)$$

où nous avons utilisé les notations concises¹ (V.8) et (V.9) — la somme sur l est une multiplication de matrices. La forme (V.12) permet des calculs plus

¹Il est facile d'obtenir l'égalité entre (V.12) et (V.2b) si l'on part de l'expression (V.12) et que l'on utilise les formules (V.6) et (IV.5) pour les matrices K et P — remonter à (V.12) à partir de (V.2b) est moins direct.

simples qu'avec l'expression (V.2b), grâce aux compensations de pôles qui y apparaissent lors du calcul des intégrations \mathcal{I} (V.8). Le cas particulier de la self énergie écrantée nous permettra d'illustrer ce mécanisme.

Lorsque l'on cherche le déplacement en énergie d'un niveau *isolé* $|\mathbf{n}_0^1\rangle$, la contribution (V.2b) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) se simplifie beaucoup : avec $s = 1$ niveau, nous obtenons immédiatement

$$(V.2b) = -\mathcal{I}_{11}^{(1)}[1] \mathcal{I}_{11}^{(1)}[\Delta E_1], \quad (V.13)$$

où nous avons imposé $i = j = 1$ dans la contribution (V.2b) des diagrammes à un photon.

V/2.2-e \diamond **Hamiltonien au second ordre**

En conclusion, il est avantageux de calculer le hamiltonien effectif au second ordre (III.51c) en partant d'une formule où certains pôles de la fonction de Green sont compensés par des facteurs de la forme ΔE_i (V.9) (ces pôles sont associés aux propagateurs externes — *cf.* p. 140). Ainsi, il est utile, pour tous les diagrammes à deux photons (échange de deux photons [BLUNDELL *et al.* 1993], polarisation du vide écrantée [ARTEMYEV *et al.* 2000], double self énergie [YEROKHIN 2000], *etc.*), de calculer $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) grâce à l'expression

$$(H_{\text{eff}}^{(2)})_{ij} = (V.10) + (V.12). \quad (V.14)$$

J'utilise cette expression comme point de départ pour mon évaluation des contributions à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ dues à la self énergie écrantée (V.1).

Dans le cas particulier d'un niveau isolé, le déplacement au second ordre — sous l'interaction \hat{H}_S^I (II.26) — s'exprime beaucoup plus simplement que (V.14). En regroupant les deux parties obtenues ci-dessus, on obtient en effet dans cette situation, grâce à (V.11) et à (V.13)

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^{(2)} &= (V.11) + (V.13) \\ &= \mathcal{I}_{11}^{(2)}[\Delta E_1] - \mathcal{I}_{11}^{(1)}[1] \mathcal{I}_{11}^{(1)}[\Delta E_1] \end{aligned} \quad (V.15)$$

comme déplacement¹ en énergie au deuxième ordre (en α). Ainsi, la méthode de la fonction de Green permet d'obtenir le déplacement au second ordre de l'énergie d'un niveau isolé simplement grâce à *trois* intégrations de contour \mathcal{I} (V.8).

¹Ce déplacement en énergie coïncide avec celui que l'on obtiendrait directement à partir d'un développement perturbatif de la fonction de Green dans (V.5).

Intégrales de contour pour la self énergie écrantée

Nous pouvons maintenant établir une liste des intégrales de contour à calculer afin d’obtenir la contribution de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif — maintenant que nous avons simplifié les intégrales de $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c). En d’autres termes, il s’agit de *définir* la partie du hamiltonien au second ordre (V.14) que l’on peut associer aux diagrammes (V.1) — et aux diagrammes (V.3).

V/2.3-a \diamond **Intégration pour un diagramme spécifique**

Afin de distinguer simplement les contributions des diagrammes (V.1) et (V.3) aux éléments de matrice (III.52) de la fonction de Green, nous *dessinons* dans chaque expression mathématique le diagramme qu’elle concerne — comme nous l’avons déjà fait pour l’élément de matrice (III.68). Ainsi, nous noterons $\mathcal{G}_{\mathcal{D}}$ la contribution de tout diagramme $\mathcal{D} = \text{I}, \text{II}, \text{III}, \text{IV}, \text{V}, \dots$ à la fonction de Green (III.10); nous ferons de même pour le symbole d’intégration \mathcal{I} (V.8) :

$$\mathcal{I}_{ij}^{\mathcal{D}}[f(E)] \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE f(E) \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle. \quad (\text{V.16})$$

Comme nous devons calculer de telles intégrales pour obtenir les contributions (V.10) et (V.12) au hamiltonien effectif, nous utilisons abondamment la notation (V.16) dans la suite.

Afin de vérifier partiellement les calculs graphiques d’intégrales $\mathcal{I}_{ij}^{\mathcal{D}}[f(E)]$ que l’on mène avec la méthode de la particule fantôme, il est utile de vérifier régulièrement l’homogénéité des expressions diagrammatiques que l’on manipule. Lorsque le diagramme \mathcal{D} ne possède pas de particule fantôme, $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ a pour dimension l’inverse d’une énergie (*cf.* p. 147) : dans ce cas, la dimension de $\mathcal{I}_{ij}^{\mathcal{D}}[f(E)]$ est tout simplement donnée par celle de la fonction $f(E)$. Cette remarque permet de vérifier l’homogénéité des contributions au hamiltonien effectif listées ci-dessous — (V.17) et (V.19) —, mais aussi celle de tous les calculs des sections V/3–V/5.

V/2.3-b \diamond **Intégrales de diagrammes à deux photons**

Avec les notations ci-dessus, la contribution à l’élément de matrice $(H_{\text{eff}}^{(2)})_{ij}$ (V.14) des diagrammes à deux photons (V.1) vaut, d’après (V.10),

$$\begin{aligned}
 & \sum_{P,P'} \frac{1}{2} \left[\left(\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_j] \right) \right. \\
 & \quad + \left(\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_j] \right) \\
 & \quad \left. + \left(\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_j] \right) \right], \tag{V.17}
 \end{aligned}$$

où la somme se fait sur les permutations P' et P des électrons entrants et sortants (respectivement) — nous avons vu dans la section III/5.2-c que ces permutations permettent de regrouper plusieurs diagrammes semblables en un seul.

Les nombreuses *symétries* de cette contribution totale des diagrammes (V.1) nous permettront de déduire tous les termes de (V.17) à partir seulement des intégrales de contour

$$\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_i] \tag{V.18a}$$

$$\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_j] \tag{V.18b}$$

et

$$\mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\Psi} P}[\Delta E_j] \tag{V.18c}$$

(nous rappelons que la notation pour la distance ΔE_i à l'énergie non perturbée $E_n^{(0)}$ est définie dans (V.9)). Je calcule les intégrales (V.18) dans les sections V/3 et V/4, ce qui permettra par symétrie d'obtenir l'ensemble de la contribution (V.17) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (V.14) des diagrammes (V.1).

V/2.3-c \diamond Intégrales de diagrammes à un photon

Pour obtenir la contribution totale de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (V.14), il ne reste plus qu'à décider de la façon d'inclure les diagrammes à *un* photon (V.3) dans (V.12). Le choix des termes à inclure se fait en reconnaissant des produits de diagrammes à un photon (V.3) qui ressemblent aux diagrammes à deux photons (V.1). Nous calculerons donc aussi les deux contributions à $(H_{\text{eff}}^{(2)})_{ij}$ (V.14) suivantes :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{P_1, P_1'} \sum_{P_2}^s \left\{ -\frac{3}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{\overleftrightarrow{\Psi} P_2}[1] \mathcal{I}_{lj}^{P_1' \overleftrightarrow{\Psi} P_1}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{il}^{\overleftrightarrow{\Psi} P_2}[\Delta E_i] \mathcal{I}_{lj}^{P_1' \overleftrightarrow{\Psi} P_1}[1] \right) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{\overleftrightarrow{\Psi} P_2}[1] \mathcal{I}_{lj}^{P_1' \overleftrightarrow{\Psi} P_1}[\Delta E_l] + \mathcal{I}_{il}^{\overleftrightarrow{\Psi} P_2}[\Delta E_l] \mathcal{I}_{lj}^{P_1' \overleftrightarrow{\Psi} P_1}[1] \right) \right\} \tag{V.19a}
 \end{aligned}$$

(qui se rapproche¹ du diagramme $(P' \overleftrightarrow{\text{---}} P)_{ij}$) et l'expression symétrique, associée elle au diagramme $(P' \overleftrightarrow{\text{---}} P)_{ij}$,

$$\sum_{\substack{P_1, P'_1 \\ P_2}} \sum_{l=1}^s \left\{ -\frac{3}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [1] \mathcal{I}_{lj}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [\Delta E_j] + \mathcal{I}_{il}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [\Delta E_i] \mathcal{I}_{lj}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [1] \right) \right. \\ \left. - \frac{1}{8} \left(\mathcal{I}_{il}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [1] \mathcal{I}_{lj}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [\Delta E_l] + \mathcal{I}_{il}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [\Delta E_l] \mathcal{I}_{lj}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [1] \right) \right\}. \quad (\text{V.19b})$$

Nous avons à nouveau utilisé des permutations de $\{1, 2\}$ (P_1 , P'_1 et P_2) pour représenter toutes les possibilité d'échange des électrons externes des diagrammes — *cf.* section III/5.2-c ; le diagramme d'échange de photon n'a besoin que d'une seule permutation P_2 , qui permet de représenter un possible échange des électrons, comme dans le diagramme (III.58).

Comme avec la contribution (V.17) des diagrammes (V.1), certains termes de (V.19) pourront se déduire *par symétrie* des autres termes ; ainsi, nous n'aurons besoin de calculer dans le détail que les intégrales \mathcal{I} (V.16) suivantes :

$$\mathcal{I}_{ij}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [1] \quad (\text{V.20a})$$

$$\mathcal{I}_{ij}^{\overleftrightarrow{\text{---}} P_2} [\Delta E_i] \quad (\text{V.20b})$$

$$\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [1] \quad (\text{V.20c})$$

et

$$\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [\Delta E_j], \quad (\text{V.20d})$$

où $i, j = 1, \dots, s$ sont des indices qui désignent les deux états entre lesquels est prise la fonction de Green dans (V.16).

V/2.3-d \diamond Conclusion

Nous avons explicité sous une forme simplifiée — *cf.* (V.10) et (V.12) — le hamiltonien effectif au second ordre $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c). Une partie de ce hamiltonien est due à la self énergie écrantée et reçoit la contribution des diagrammes à deux photons (V.1), qui contribuent de la quantité (V.17), et des diagrammes à un photon (V.3) qui donnent la quantité (V.19). Grâce à l'usage de symétries, nous avons vu qu'il n'était nécessaire que de calculer

¹Par exemple, dans le tout premier terme de (V.19a), $\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1} [\Delta E_j]$ contient d'après la définition (V.16) l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^l | \mathcal{G}_{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1}(E) \otimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$: les électrons entrant dans le diagramme $\overleftrightarrow{\text{---}}$ qui représente cet élément de matrice — par les règles de Feynman (*cf.* p. 108) — sont donc ceux de l'état $|\mathbf{n}_0^j\rangle$. De la même façon, l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^l | \mathcal{G}_{P'_1 \overleftrightarrow{\text{---}} P_1}(E) \otimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ se représente par un diagramme où l'un des électrons *de l'état* $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ subit la self énergie $\overleftrightarrow{\text{---}}$.

les intégrales de contour \mathcal{I} (V.16) listées dans (V.18) et (V.20) — dans le cas particulier d'un niveau *isolé*, le calcul du déplacement au second ordre (V.15) nécessite naturellement moins d'intégrations.

Nous appliquons dans les section V/3 et V/4 la méthode de la particule fantôme (section IV/3) au calcul des intégrales de contour (V.18) et (V.20). Ensuite, nous regroupons et simplifions dans la section V/5 les résultats, afin d'obtenir la contribution totale

$$(V.17) + (V.19) \tag{V.21}$$

de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif au second ordre $H_{\text{eff}}^{(2)}$.

SECTION 3 (Chapitre V)

Intégrations entre états non dégénérés

V/3.1

Introduction et notations

V/3.1-a \diamond Énergies différentes

Nous calculons dans cette partie toutes les intégrales de contour \mathcal{I} (V.16) qui mènent à l'évaluation de la contribution de la self énergie écrantée (V.21) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c), mais dans un cas particulier : nous nous restreignons aux intégrations (V.16) où les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ (entre lesquels est prise la fonction de Green) *ne possèdent pas la même énergie* (i. e., $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \neq E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, pour reprendre les notations de la section IV/1.2).

Nous le faisons pour la raison suivante. Comme les états « externes » $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ contribuent aux pôles de l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ de \mathcal{I} (V.16) — cf. p. 140 —, l'ordre de singularité de ces pôles en $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ dépend de l'égalité (ou non) de ces deux énergies : appliquer la formule de Cauchy (IV.6) au calcul des intégrales (V.16) demande donc de distinguer ces deux cas. Je traite dans la section V/4 l'évaluation des éléments de matrice (V.21) de la self énergie écrantée entre états de *même* énergie, grâce à la méthode de la particule fantôme.

V/3.1-b \diamond Notation pour les éléments de matrice

Afin de faciliter les dérivations par la méthode graphique de la particule fantôme (cf. section IV/3), nous allons confondre une fois de plus tout diagramme avec sa contribution aux éléments de matrice (III.52) : c'est le principe même des règles de Feynman données dans les tables III.1 et III.2 (cf. p. 108) et IV.1, p. 149. Ainsi, nous noterons, pour tout diagramme \mathcal{D}

(avec permutations, comme par exemple $P' \mp P$),

$$\mathcal{D}_{ij} \equiv \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle. \quad (\text{V.22})$$

(Nous rappelons que ces éléments de matrice suivent la définition explicite (III.33).) Il est nécessaire de préciser comment les électrons *individuels* des états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ sont reliés aux propagateurs externes du diagramme \mathcal{D} : nous convenons d'attacher les états de Dirac $n_{P'(1)}^j$ (entrant) et $n_{P(1)}^i$ (sortant) à la ligne du *haut* du diagramme \mathcal{D} , les états $n_{P'(2)}^j$ (entrant) et $n_{P(2)}^i$ (sortant) à la ligne d'en dessous, *etc.* (comme nous l'avons par exemple fait dans le diagramme (III.59). Comme nous utiliserons la méthode graphique de la section IV/3, le diagramme \mathcal{D} peut bien sûr contenir des propagateurs de particule fantôme.

V/3.1-c \diamond Groupes de contours

Comme Γ_0 est un contour composé de multiples parties (entourant chacune une énergie non perturbée des s états étudiés — *cf.* section IV/2.2), tout calcul d'intégrale de contour par \mathcal{I} (V.16) se scinde en plusieurs contributions, chacune provenant de l'intégration autour de *l'une* des s énergies non perturbées étudiées. Il est ainsi nécessaire de calculer *séparément* sur chaque sous-contour de Γ_0 les intégrales (V.18) et (V.20).

Ainsi, lors de l'évaluation d'une intégrale de contour impliquant l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$, nous distinguerons les contours Γ_0^i et Γ_0^j (qui entourent respectivement les énergies $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ des états externes et sont donc particuliers) et l'ensemble des autres contours

$$\Gamma_0^{\neq ij} \equiv \bigcup_{\substack{k=1, \dots, s \\ E_{\mathbf{n}^k}^{(0)} \notin \{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}, E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}\}}} \Gamma_0^k. \quad (\text{V.23})$$

Afin de pouvoir séparer les intégrales \mathcal{I} (V.16) en contributions provenant chacune d'un sous-contour γ (que nous prendrons ici égal soit à Γ_0^i , à Γ_0^j ou à $\Gamma_0^{\neq ij}$), nous décidons d'indiquer explicitement le contour d'intégration utilisé dans \mathcal{I} (V.16) :

$$\mathcal{I}_{ij; \gamma}^{\mathcal{D}}[f(E)] \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} dE f(E) \times \langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \bigotimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle \quad (\text{V.24})$$

(ce qui permet d'écrire par exemple $\mathcal{I}_{ij}^{\mathcal{D}}[f(E)] = \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0}^{\mathcal{D}}[f(E)] = \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{\mathcal{D}}[f(E)] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{\mathcal{D}}[f(E)] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{\mathcal{D}}[f(E)]$, ce que nous utiliserons systématiquement, puisque utiliser le théorème des résidus dans le contour total Γ_0 revient à l'appliquer individuellement dans chacun des sous-contours définis ici).

V/3.1-d \diamond Organisation des calculs

Nous pouvons maintenant appliquer la méthode de la particule fantôme (section IV/3) à toutes les intégrations (V.18) et (V.20). Les sections qui suivent (V/3.2–V/3.5) contiennent le résultat de ces intégrations pour le cas où les états entre lesquels est calculé l'élément de matrice de (V.24) ne possèdent pas la même énergie (l'autre cas sera étudié dans la section V/4). Bien que mes calculs soient adaptés à la self énergie écrantée, j'y inclue quelques détails pratiques qui devraient permettre d'obtenir systématiquement *toute* contribution au hamiltonien effectif (III.39a) de la méthode de la fonction de Green à deux temps.

Nous utiliserons beaucoup les deux importantes notations introduites pour représenter la particule fantôme (*cf.* (IV.22) et la table IV.1, p. 149) et les sommes de diagrammes qui contiennent des propagateurs fantômes (IV.23). Ces deux notations nous permettront d'effectuer la quasi-totalité des calculs du hamiltonien effectif de façon *graphique*.

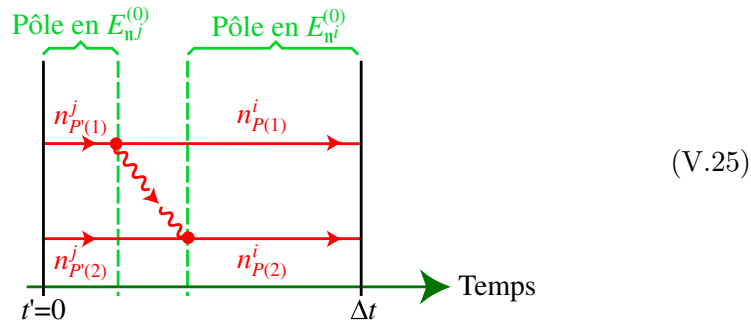
V/3.2

Échange de photon

Nous calculons dans cette partie les intégrales (V.20a) et (V.20b) dues à l'échange de photon \mp (avec $E_{n^i}^{(0)} \neq E_{n^j}^{(0)}$). Ces intégrales peuvent être déduites de ARTEMYEV *et al.* [2000] (équations (27) et (28)), mais nous les effectuons à des fins d'exemple par la méthode de la particule fantôme — qui remplace avantageusement les calculs *ad hoc* de ARTEMYEV *et al.* [2000].

V/3.2-a \diamond Lecture des singularités

On voit sur l'ordonnancement temporel



ainsi que sur toutes les autres possibilités de classement des temps d'interaction — *cf.* section IV/3.3-b — que les seules singularités de $(\mp P_2)_{ij}$ — *cf.* (V.22) — situées dans le contour non perturbé Γ_0 sur lequel il nous faut intégrer (afin d'obtenir (V.20a) et (V.20b)) sont en $E = E_{n^i}^{(0)}$ et $E = E_{n^j}^{(0)}$. On

constate de plus sur (V.25) que ces deux pôles sont simples¹. (Nous avons noté l'état de Dirac de chaque électron externe en utilisant notre convention (III.34).)

V/3.2-b \diamond Extraction des pôles

Nous pourrions extraire explicitement les *deux* pôles en E de l'élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mp P_2}(E) \otimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ utilisé dans (V.20a) et (V.20b) — grâce au procédé itératif de la méthode de la particule fantôme exposé p. 154. Cependant, comme nous devons intégrer *séparément* dans chacun des contours Γ_0^i , Γ_0^j et $\Gamma_0^{\neq ij}$, il est en fait plus simple de procéder de la façon suivante (qui est générale) : pour calculer $\mathcal{I}_{ij,\gamma}^{\mathcal{D}}[f(E)]$ (où γ est un sous-contour quelconque de Γ_0), il est pratique de n'extraire de \mathcal{D} que les singularités qu'il possède dans γ (cela est lié au fait qu'il est inutile de connaître — et de chercher — la structure analytique de l'élément de matrice en dehors de γ pour pouvoir utiliser la formule de Cauchy (IV.6) sur ce contour).

Ainsi, pour l'élément de matrice $(\mp P_2)_{ij}$, nous pouvons extraire le pôle qu'il possède en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ grâce à la technique graphique² de la section IV/3.3-c :

$$\left(\begin{array}{c} \xrightarrow{P_2(1)} \\ \xrightarrow{P_2(2)} \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} \xrightarrow{P_2(1)} \\ \xrightarrow{P_2(2)} \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} \quad (\text{V.26a})$$

où nous avons utilisé la notation ΔE_i définie par (V.9). La régularité du diagramme³ du second membre à l'intérieur de Γ_0^i vient du fait que les seules singularités de $(\mp P_2)_{ij}$ contenues dans Γ_0 sont deux pôles simples en $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, avec par hypothèse $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \neq E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$.

Afin de pouvoir réaliser les intégrations de (V.20a) et de (V.20b) le long des autres contours Γ_0^j et $\Gamma_0^{\neq ij}$, nous devons expliciter de la même façon les singularités de l'élément de matrice $(\mp P_2)_{ij}$ dans ces contours : la lecture graphique faite ci-dessus et l'extraction explicite de pôle suivant la

¹On retrouve la propriété générale d'existence de pôles aux états externes de l'élément de matrice de la fonction de Green — cf. p. 140.

²Nous rappelons que le diagramme correspondant à un élément de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ se représente avec l'état $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ en entrée et l'état $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ en sortie, conformément à l'interprétation de cet élément de matrice comme une amplitude de probabilité de passer de l'état j à l'état i — cf. section III/5.2-d. Ainsi, avec notre choix d'orientation vers la droite des flèches des propagateurs électroniques, cela implique que l'état entrant à gauche du diagramme \mp de l'élément de matrice $(\mp P_2)_{ij}$ est l'état $|\mathbf{n}_0^j\rangle$.

³Nous confondons une fois de plus un diagramme avec l'élément de matrice correspondant — cf. (V.22).

section IV/3.3-c donne immédiatement cette structure analytique :

$$\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j}, \quad (\text{V.26b})$$

$$= \underbrace{\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^{\neq ij}}. \quad (\text{V.26c})$$

Il est possible, grâce à la méthode de la particule fantôme, d'obtenir dans une *unique* expression l'ensemble des singularités d'un diagramme, ce que nous aurions pu faire pour l'échange de photon \mp . Cependant, il est plus pratique de mener les calculs grâce à une expression du diagramme à calculer *spécifique à chaque contour d'intégration*, comme nous venons de le faire : pour calculer une intégrale par le théorème des résidus, il n'est nécessaire que de connaître les singularités que la fonction intégrée possède *dans le contour d'intégration*.

V/3.2-c \diamond Contributions au hamiltonien effectif

Les contributions (V.20a) et (V.20b) de l'échange de photon se calculent directement grâce à la formule de Cauchy (IV.6) appliquée aux structures analytiques (V.26). Ainsi, d'après les définitions de la section V/3.1, on peut décomposer les intégrations sur le contour total Γ_0 selon

$$(\text{V.20a}) \equiv \mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[1] = \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{\mp P_2}[1] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{\mp P_2}[1] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{\mp P_2}[1], \quad (\text{V.27a})$$

où par application de la formule de Cauchy (IV.6) sur (V.26a),

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{\mp P_2}[1] = \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_n^{(i)}}, \quad (\text{V.27b})$$

où l'on a de même grâce à (V.26b)

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{\mp P_2}[1] = \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_n^{(j)}}, \quad (\text{V.27c})$$

et où enfin l'absence de singularités dans $\Gamma_0^{\neq ij}$ de l'élément de matrice (V.26c) donne simplement

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{\mp P_2}[1] = 0. \quad (\text{V.27d})$$

Nous voyons sur ce premier exemple que la méthode de la particule fantôme permet de réaliser très facilement les intégrations de contour qui mènent au hamiltonien effectif. La forme mathématique des résultats (V.27) peut directement s'obtenir en utilisant la définition du symbole de sommation

pointillé (IV.23) et les règles de Feynman des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108) et IV.1, p. 149.

Les structures analytiques (V.26) permettent d'accéder tout aussi simplement à la seconde intégrale de contour à calculer et définie par l'échange d'un photon :

$$(V.20b) \equiv \mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{\mp P_2}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{\mp P_2}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{\mp P_2}[\Delta E_i], \quad (V.28a)$$

où par application de la formule de Cauchy (IV.6) sur (V.26a),

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = 0 \quad (V.28b)$$

(On voit ici l'intérêt d'avoir fait apparaître dans $H_{\text{eff}}^{(2)}$ les distances ΔE_i (V.9) aux énergies non perturbées, grâce à (V.10) et (V.12) : de tels facteurs peuvent compenser exactement des pôles.) ; de même¹

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\text{---}} P_2(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ 2 \xrightarrow{\text{---}} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}}, \quad (V.28c)$$

et où enfin (V.26c) donne simplement

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = 0 \quad (V.28d)$$

par régularité analytique.

Nous avons donc réalisé dans (V.27) et (V.28) les deux intégrations qu'il nous fallait calculer pour prendre en compte l'échange de photon \mp dans nos calculs de self énergie écrantée. Ces résultats sont valables pour des états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ *non dégénérés* — nous avons obtenu les propriétés analytiques (V.26) $(\mp P_2)_{ij}$ dans ce cas. Le cas dégénéré sera traité dans la section V/4.2.

V/3.3

Self énergie

Évaluons maintenant les dernières contributions des diagrammes à un photon (V.3) : $\mathcal{I}_{ij}^{P_1' \leftrightarrow P_1}[1]$ (V.20c) et $\mathcal{I}_{ij}^{P_1' \leftrightarrow P_1}[\Delta E_j]$ (V.20d).

V/3.3-a \diamond Règles de sélection

Le cas de la self énergie (*cf.* (V.3)),

$$\begin{array}{ccc} P'(1) \xrightarrow{\text{---}} \bullet \text{---} \bullet \xrightarrow{\text{---}} P(1) \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ P'(2) \xrightarrow{\text{---}} \bullet \text{---} \bullet \xrightarrow{\text{---}} P(2) \end{array} \quad (V.29)$$

¹Comme noté dans (V.22), les diagrammes dépendent de l'énergie virtuelle E — qui est l'énergie totale qui entre dans le diagramme, comme montré dans la section III/5.2-d.

est particulièrement simple, car l'élément de matrice $(P' \rightleftharpoons P)_{ij}$ subit des règles de sélection [LE BIGOT *et al.* 2001b]. Ainsi, pour que

$$\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \rightleftharpoons P}(E) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle = 0, \quad (\text{V.30})$$

il suffit (en suivant le diagramme (V.29) et la notation (V.22) pour les états électroniques individuels)

- que les deux électrons du propagateur sans interaction *diffèrent* (*i. e.* que $n'_{P'(2)} \neq n_{P(2)}$) : cela provient directement de la règle de Feynman de la p. 108 pour un propagateur sans interaction — il ne peut changer l'état qu'il propage ;
- ou bien que les électrons $n'_{P'(1)}$ et $n_{P(1)}$ connectés à la self énergie ne possèdent pas strictement les *mêmes nombres quantiques de moment cinétique, projection du moment cinétique et parité*. Cette deuxième règle de sélection peut se démontrer en utilisant des techniques classiques de calculs angulaires sur les bi-spineurs de Dirac [GRANT 1970], appliquées à l'expression mathématique donnée par les règles de Feynman pour l'élément de matrice de (V.30).

V/3.3-b \diamond Choix de niveaux quasi-dégénérés

Autrement dit, si $\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}_{P' \rightleftharpoons P}(E) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle \neq 0$, alors $n'_{P'(2)} = n_{P(2)}$ et les états $n'_{P'(1)}$ et $n_{P(1)}$ ne peuvent différer que par leur nombre quantique *principal*. Ainsi, sauf dans le cas $|\mathbf{n}'_0\rangle = |\mathbf{n}_0\rangle$, de tels états $|\mathbf{n}'_0\rangle$ et $|\mathbf{n}_0\rangle$ possèdent des énergies (selon \hat{H}_0 (II.12)) « très » différentes.

Comme le hamiltonien effectif (III.39a) est construit pour une théorie des perturbations sur des états *quasi-dégénérés* $|\mathbf{n}_0^{1,\dots,s}\rangle$, nous considérerons qu'aucun couple d'états possédant des énergies si éloignées n'apparaît dans les s niveaux qui définissent ce hamiltonien¹. En conséquence, la self énergie donne une contribution particulièrement simple aux éléments de matrice $(P'_1 \rightleftharpoons P_1)_{ij}$:

$$\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{P'_1 \rightleftharpoons P_1}(E) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle = 0 \quad \text{si } i \neq j \text{ ou } P'_1 \neq P_1. \quad (\text{V.31})$$

(Nous étudierons cet élément de matrice entre des états de même énergie dans la section V/4.3.)

¹C'est par exemple le cas des niveaux $(1s2p_{1/2})_{J=1}$ et $(1s2p_{3/2})_{J=1}$, qui sont quasi-dégénérés dans les héliumoides de charge nucléaire faible ou moyenne [ARTEMYEV *et al.* 2000] — les notations des niveaux de l'équation de Dirac sont précisées dans la section VI/2.1.

V/3.3-c \diamond **Application au hamiltonien effectif**

En conséquence, la self énergie ne contribue pas au hamiltonien effectif entre états d'énergies différentes : si $E_{n^i}^{(0)} \neq E_{n^j}^{(0)}$ (ou si $i \neq j$),

$$(V.20c) \equiv \mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \rightleftharpoons P_1} [1] = 0 \quad (V.32a)$$

et

$$(V.20d) \equiv \mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \rightleftharpoons P_1} [\Delta E_j] = 0. \quad (V.32b)$$

Le résultat (V.31) simplifie beaucoup le calcul des contributions (V.19) des diagrammes à un photon, puisqu'il indique que les matrices $\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \rightleftharpoons P_1} [1]$ et $\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \rightleftharpoons P_1} [\Delta E_j]$ sont *diagonales*, et même *nulles* si $P'_1 \neq P_1$. En conséquence, les sommes sur l'indice muet l de (V.19) (*i. e.* les produits de matrices) ne contiennent qu'*un seul terme* non nul, et la sommation sur la permutation P'_1 se réduit elle aussi à un seul terme, si bien que

$$(V.19a) = -\frac{1}{2} \sum_{P_1, P_2} \left\{ \mathcal{I}_{ij}^{\rightleftharpoons P_2} [1] \mathcal{I}_{jj}^{P_1 \rightleftharpoons P_1} [\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij}^{\rightleftharpoons P_2} [\Delta E_i] \mathcal{I}_{jj}^{P_1 \rightleftharpoons P_1} [1] \right\} \quad (V.33a)$$

et, pour la contribution symétrique,

$$(V.19b) = -\frac{1}{2} \sum_{P_1, P_2} \left\{ \mathcal{I}_{ii}^{P_1 \rightleftharpoons P_1} [1] \mathcal{I}_{ij}^{\rightleftharpoons P_2} [\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ii}^{P_1 \rightleftharpoons P_1} [\Delta E_i] \mathcal{I}_{ij}^{\rightleftharpoons P_2} [1] \right\}. \quad (V.33b)$$

Nous utiliserons ce résultat relativement simple dans le calcul final du hamiltonien effectif (section V/5).

V/3.4

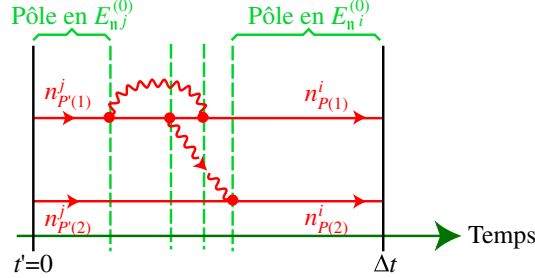
Vertex

Maintenant que sont évaluées les intégrales de contour (V.20) dues aux diagrammes à *un* photon (V.3) — pris entre états d'énergies différentes —, nous pouvons passer aux contributions (V.18) des diagrammes à *deux* photons (V.1).

V/3.4-a \diamond **Lecture des pôles**

Commençons par la contribution de « vertex » $\mathcal{I}_{ij}^{P'_1 \rightleftharpoons P} [\Delta E_j]$ (V.18c). Celle-ci s'obtient grâce à la connaissance des singularités de l'élément de matrice $(P'_1 \rightleftharpoons P)_{ij}$. En utilisant la technique de lecture des pôles de la section IV/3.3-b, il n'est pas difficile de voir que les seules singularités de $(P'_1 \rightleftharpoons P)_{ij}$ dans le contour d'intégration Γ_0 de (V.18c) sont un pôle

simple en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et un autre en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$; ces pôles se voient par exemple dans le diagramme ordonné en temps suivant :



V/3.4-b \diamond Extraction des pôles

Chacun des deux pôles aux énergies des états externes s'extrait immédiatement grâce à la technique décrite dans la section IV/3.3-c :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \rightarrow \dots \rightarrow P(1) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P'(2) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \rightarrow \dots \rightarrow P(1) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P'(2) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} \quad (\text{V.34a})$$

$$= \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \rightarrow \dots \rightarrow P(1) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P'(2) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} \quad (\text{V.34b})$$

$$= \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \rightarrow \dots \rightarrow P(1) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P'(2) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^{\neq ij}} \quad (\text{V.34c})$$

On retrouve ici exactement la même structure (V.26) que pour l'échange de photon \mp .

V/3.4-c \diamond Contributions au hamiltonien effectif

Les structures analytiques (V.34) permettent de réaliser directement l'intégration $\mathcal{I}_{ij}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j]$ (V.18c) :

$$\mathcal{I}_{ij}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] = \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] \quad (\text{V.35a})$$

où par application de la formule de Cauchy (IV.6) sur (V.34a),

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] = \left[\Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \rightarrow \dots \rightarrow P(1) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P'(2) \\ \leftarrow \dots \leftarrow P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}}, \quad (\text{V.35b})$$

où l'on a de même grâce à (V.34b)

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \leftrightarrow P}[\Delta E_j] = 0 \quad (\text{V.35c})$$

(par compensation du pôle simple de (V.34b) en $E = E_{\mathbf{n}j}^{(0)}$) et

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mp P}[\Delta E_j] = 0 \quad (\text{V.35d})$$

par analyticité de (V.34c) dans le contour $\Gamma_0^{\neq ij}$.

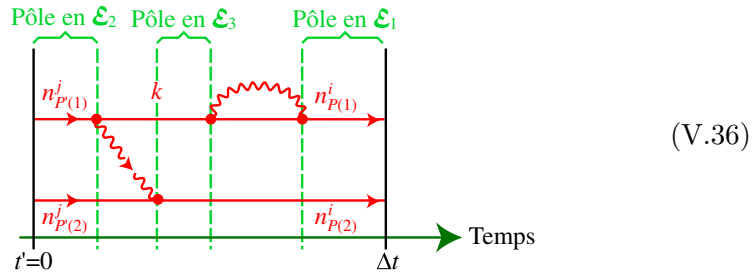
Nous avons ainsi réalisé l'unique intégration de contour liée au diagramme \mp qu'il était nécessaire de calculer pour obtenir la contribution (V.21) de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif (III.39a) — *cf.* section V/2.3. Notons que les intégrations (V.35) que nous venons d'effectuer sont dans leur principe strictement semblables à celles obtenues pour l'échange de photon (V.28) : les structures analytiques (V.34) du vertex sont en effet identiques à celles de \mp (V.26). Ces deux diagrammes possèdent un pôle simple dans Γ_0^i , un autre dans Γ_0^j , et sont réguliers dans le reste du contour ($\Gamma_0^{\neq ij}$) — ces diagrammes ne contiennent que les pôles dûs aux états externes d'un diagramme (*cf.* p. 140). Ainsi, la méthode de la fonction de Green à deux temps, utilisée selon la méthode systématique que j'utilise ici, mène à des calculs qui peuvent servir pour de nombreux diagrammes.

V/3.5

Self énergie écrantée

V/3.5-a \diamond Diagrammes réductibles et irréductibles

Nous terminons le calcul des intégrations de la section V/2.3 par le cas le plus compliqué : celui des diagrammes (V.1a) de la self énergie écrantée, *i. e.* de $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp P}[\Delta E_i]$ (V.18a) et $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp P}[\Delta E_j]$ (V.18b) (toujours dans le cas $E_{\mathbf{n}i}^{(0)} \neq E_{\mathbf{n}j}^{(0)}$, le cas $E_{\mathbf{n}i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}j}^{(0)}$ étant envisagé dans la section V/4). La complication par rapport aux diagrammes des sections V/3.2–V/3.4 provient de l'apparition possible dans le contour Γ_0 d'un pôle supplémentaire dû à l'état de Dirac intermédiaire¹ k ; on voit dans l'ordonnancement temporel



la présence de *trois*² pôles de $(P' \mp P)_{ij}$: en $E = \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ et \mathcal{E}_3 , où $\mathcal{E}_1 \equiv E_{\mathbf{n}i}^{(0)}$, $\mathcal{E}_2 \equiv E_{\mathbf{n}j}^{(0)}$ et $\mathcal{E}_3 \equiv \varepsilon_{n_{P(2)}^i} + \varepsilon_k$. (On peut aisément se convaincre de l'absence

¹Nous utilisons à nouveau la notation par laquelle un propagateur électronique complet (IV.11a) est remplacé par un seul de ses termes — *cf.* section IV/3.3-b.

²Deux de ces pôles sont liés aux états entre lesquels nous calculons l'élément de matrice $(P' \mp P)_{ij}$, comme toujours — *cf.* p. 140.

où l'électron intermédiaire k est tel que $\varepsilon_{n_{P(2)}^i} + \varepsilon_k$ ne tombe pas dans le contour Γ_0 (nous notons k_{irr} un tel état). La lecture des pôles en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ sur (V.36) permet d'extraire immédiatement les deux pôles de $(P' \mp \mathcal{P})_{ij}$ contenus dans Γ_0 — cf. section IV/3.3-c — :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} \quad (\text{V.39a})$$

$$= \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} \quad (\text{V.39b})$$

$$= \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^{\neq ij}} \quad (\text{V.39c})$$

Première
intégration

Nous pouvons grâce à (V.39) calculer de façon immédiate les intégrations¹ $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i]$ (V.18a) et $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_j]$ (V.18b) par la formule de Cauchy (IV.6). Pour la première intégration, nous allons effectuer l'intégration dans le contour Γ_0 (qui entoure l'ensemble des énergies non perturbées) dans chacun des trois sous-contours qui le composent (cf. section V/3.1-c)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] &= \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i], \end{aligned} \quad (\text{V.40a})$$

où

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] = 0 \quad (\text{V.40b})$$

(par compensation du pôle de (V.39a) en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$), où la structure analytique (V.39b) donne immédiatement

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] = \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}}, \quad (\text{V.40c})$$

et où enfin (V.39c) permet d'obtenir

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mp \mathcal{P}_{\text{irr}} P}[\Delta E_i] = 0. \quad (\text{V.40d})$$

¹Nous indiquons grâce à l'indice « irr » que nous ne considérons que les diagrammes où l'on a sélectionné dans le propagateur intermédiaire (IV.11a) les états $k = k_{\text{irr}}$ qui participent à la contribution irréductible définie plus haut (i. e. ceux pour lesquels $\varepsilon_{n_{P(2)}^i} + \varepsilon_k$ est hors du contour Γ_0).

Seconde
intégration

Quant à la seconde intégration à calculer pour la contribution irréductible de (V.38), $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j]$ (V.18b), elle se déduit de la même façon des structures analytiques (V.39) :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] & \quad (V.41a) \\ &= \mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^i}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^j}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^{\neq ij}}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j], \end{aligned}$$

où la structure analytique (V.39a) donne immédiatement

$$\mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^i}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] = \left[\Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}}, \quad (V.41b)$$

où

$$\mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^j}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] = 0, \quad (V.41c)$$

(par compensation du pôle de (V.39b) en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$), et où enfin (V.39c) mène directement à

$$\mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^{\neq ij}}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] = 0. \quad (V.41d)$$

Identité de
structures
analytiques

Nous avons donc calculé dans (V.40) et (V.41) les deux contributions *irréductibles* de la self énergie écrantée (V.38) dont nous avons besoin — *cf.* section V/2.3. Nous n'avons calculé ces contributions irréductibles à $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_i]$ et $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j]$ que pour des énergies $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ différentes ; nous étudions le cas $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ dans la section V/4.5. Tout comme pour le diagramme de vertex calculé dans la section V/3.4, nous avons mené dans (V.40) et (V.41) des calculs strictement semblables à ceux (V.28) de l'échange de photon — puisque la structure analytique de la self énergie écrantée irréductible (V.39) est la même que celle de l'échange de photon (V.26). En pratique, donc, après avoir repéré graphiquement dans les contributions irréductibles de (V.36) l'existence des mêmes singularités que dans l'échange de photon (V.25), on peut *immédiatement* obtenir le résultat des deux intégrations en question :

$$\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_i] = \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}}$$

et

$$\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\mathcal{I}}\overline{\mathcal{I}}\text{irr}P}[\Delta E_j] = \left[\Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} \text{---} \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}},$$

V/3. Intégrations entre états non dégénérés

sont les analogues du résultat (V.28) déduit de la structure analytique commune à l'échange de photon (V.26), au vertex (V.34) et à la self énergie écrantée irréductible (V.39).

V/3.5-c \diamond Contribution réductible

Il nous faut maintenant étudier les autres contributions du diagramme de (V.36) : celles où l'état intermédiaire contribue à un pôle $\mathcal{E}_3 \equiv \varepsilon_k + \varepsilon_{n_{P(2)}^i}$ situé dans le contour d'intégration Γ_0 (contributions *réductibles*).

Règles de sélection

Grâce aux règles de sélection sur la self énergie énoncées dans la section V/3.3, il n'existe en fait qu'un seul état de Dirac k pour lequel cela se produit [LE BIGOT *et al.* 2001b] : celui où $k = n_{P(1)}^i$, *i. e.* lorsque l'état intermédiaire coïncide avec l'état sortant de la ligne du haut, dans le diagramme de (V.36). En effet, pour que ce diagramme ne donne pas (au travers des règles de Feynman) une contribution nulle à l'élément de matrice $(P' \text{---} P)_{ij}$, il faut que les états k et $n_{P(1)}^i$ ne diffèrent que par leur nombre quantique principal — *cf.* section V/3.3. Mais les énergies $\varepsilon_k + \varepsilon_{n_{P(2)}^i}$ et $\varepsilon_{n_{P(1)}^i} + \varepsilon_{n_{P(2)}^i}$ (énergie de l'état sortant $|n_0^i\rangle$) sont, pour les contributions réductibles, quasi-dégénérées (puisque toutes deux dans le contour Γ_0) : comme nous considérons qu'aucune paire d'état quasi-dégénérés ne diffère que par le changement du nombre quantique principal d'un électron — l'écart d'énergie entre ces deux états serait trop grand, *cf.* section V/3.3 —, la seule façon pour une contribution réductible de ne pas donner un élément de matrice $(P' \text{---} P)_{ij}$ nul est d'avoir $k = n_{P(2)}^i$. En d'autres termes, les règles de sélection sur la self énergie contraignent ces deux états à posséder les mêmes nombres quantiques de moment cinétique et de parité, et le fait que les énergies non perturbées soient proches les force à posséder aussi le même nombre quantique principal.

En conséquence, nous cherchons à évaluer la contribution du diagramme

aux intégrations de contour $\mathcal{I}_{ij}^{P' \text{---} P}[\Delta E_i]$ (V.18a) et $\mathcal{I}_{ij}^{P' \text{---} P}[\Delta E_j]$ (V.18b). Avec les résultats des sections V/3.2–V/3.4, nous aurons ainsi calculé par la méthode de la particule fantôme l'*ensemble* des intégrales qu'il nous fallait obtenir pour accéder au hamiltonien effectif entre des états d'énergies *différentes* — *cf.* section V/2.3.

Lecture des pôles

L'ordonnancement temporel (V.36) montre que le diagramme (V.42) donne à l'élément de matrice¹ $(P' \text{---}_{\text{red}} P)_{ij}$ des pôles dans Γ_0 : un pôle

¹Tout comme pour la contribution irréductible, nous indiquons explicitement que le propagateur intermédiaire (IV.11a) est remplacé par un ou plusieurs de ses termes ; pour

simple en $E = E_{n^j}^{(0)}$ et un pôle *double* en $E = E_{n^i}^{(0)}$. En considérant les autres ordonnancements temporels des points d'interaction, il est facile de constater qu'aucune autre singularité de $(P' \mp \mathcal{P}_{\text{réd}} P)_{ij}$ n'apparaît dans le contour Γ_0 — cf. section IV/3.3-b. Nous pouvons extraire comme précédemment les singularités de cet élément de matrice présentes dans chacun des contours individuels définis dans la section V/3.1 — grâce à la technique de la particule fantôme décrite dans la section IV/3.3-c.

Pôle dans $\Gamma_0^{\neq ij}$ Les singularités de $(P' \mp \mathcal{P}_{\text{réd}} P)_{ij}$ dans le contour Γ_0 sont situées en $E = E_{n^i}^{(0)}$ et en $E = E_{n^j}^{(0)}$, la contribution réductible est *régulière* dans $\Gamma_0^{\neq ij}$:

$$\underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^{\neq ij}} \quad (\text{V.43})$$

Pôle dans Γ_0^j Le pôle simple en contenu dans Γ_0^j s'extrait exactement comme dans (V.39b) :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} \quad (\text{V.44})$$

Pôle dans Γ_0^i Le pôle double contenu dans Γ_0^i s'extrait quant à lui en deux itérations, comme décrit dans la section IV/3.3-e : le premier ordre de la singularité s'extrait par exemple avec

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \\ &= \frac{1}{\Delta E_i} \left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} + \left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \end{aligned} \quad (\text{V.45})$$

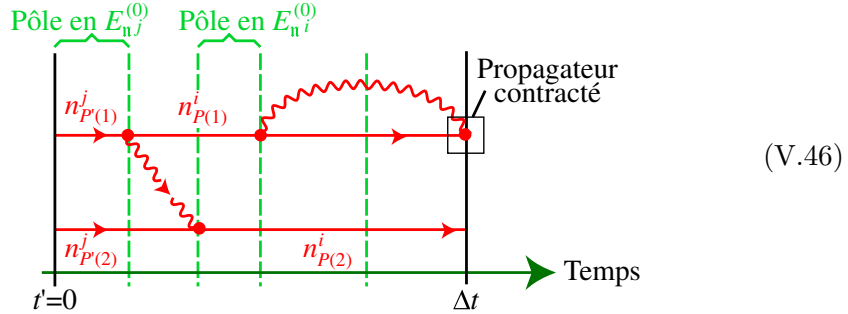
où nous avons utilisé la forme explicite (IV.22) de la sommation (IV.23) afin de pouvoir étudier individuellement les propriétés analytiques de chacun des deux termes que nous avons séparés.

Les singularités que le diagramme

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \text{---} P(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij}$$

la contribution réductible, $P' \mp \mathcal{P}_{\text{réd}} P$ signifie que seule la contribution du terme $k = n_{P(1)}^i$ de ce propagateur est retenue — cf. (V.37) (p. 181) et la discussion ci-dessus.

de (V.45) contient se voit immédiatement dans l'ordonnement temporel suivant :



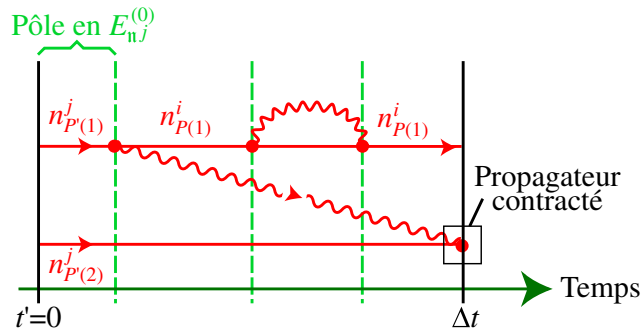
(Cet ordonnancement temporel contient comme il se doit un propagateur contracté, car provenant d'un propagateur fantôme — *cf.* (IV.27).) Ainsi, ce premier diagramme contient un pôle simple à l'intérieur du contour Γ_0^i . Il est facile de constater que les autres ordonnancements temporels des interactions ne donnent à ce diagramme aucune singularité supplémentaire dans Γ_0^i . Nous extrayons la singularité contenue dans le contour Γ_0^i comme décrit dans la section IV/3.3-c :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_{P'(1)}^j \\ n_{P'(2)}^j \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_{P(1)}^i \\ n_{P(2)}^i \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}. \quad (\text{V.47})$$

Le diagramme

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_{P(1)}^i \\ n_{P(2)}^i \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}$$

de (V.45) ne possède quant à lui aucune singularité à l'intérieur du contour Γ_0^i , comme on peut le voir en étudiant ses singularités grâce à l'ordonnement temporel suivant et à ses diverses variations :



i. e.,

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_{P(1)}^i \\ n_{P(2)}^i \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}. \quad (\text{V.48})$$

Nous obtenons donc finalement grâce aux dérivations graphiques (V.45), (V.47) et (V.48) la structure analytique détaillée de la self énergie écrantée réductible (V.42) dans Γ_0^i :

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(2) \end{array} \quad (V.49) \\
 &= \frac{1}{\Delta E_i^2} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(2) \end{array} \right)}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} + \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(2) \end{array} \right)}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}.
 \end{aligned}$$

(Nous retrouvons ainsi dans le cadre de la fonction de Green à deux temps la forme générale (B.5b) des termes perturbatifs d'une fonction singulière.)

Calcul des
intégrations

Il est maintenant facile de calculer par la formule de Cauchy (IV.6) les dernières intégrales de contour que nous avons à effectuer pour obtenir le hamiltonien effectif entre états non dégénérés : $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i]$ et $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_j]$ — cf. (V.18a) et (V.18b). Nous obtenons ainsi grâce aux structures analytiques dans $\Gamma_0^{\neq ij}$ (V.43), Γ_0^j (V.44) et Γ_0^i (V.49) que

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{I}_{ij}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] \\
 &= \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i], \quad (V.50a)
 \end{aligned}$$

avec

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] = \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{n^i}^{(0)}} \quad (V.50b)$$

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] = \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E_{n^j}^{(0)}} \quad (V.50c)$$

et

$$\mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_i] = 0. \quad (V.50d)$$

Toujours grâce au théorème de Cauchy, cette fois-ci appliqué aux structures analytiques (V.43), (V.44) et (V.49), on obtient la dernière contribution à calculer :

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{I}_{ij}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_j] \\
 &= \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^i}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^j}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_j] + \mathcal{I}_{ij; \Gamma_0^{\neq ij}}^{P' \mathbb{I} \Psi \text{-réd} P}[\Delta E_j], \quad (V.51a)
 \end{aligned}$$

avec

$$\mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^i}^{P'\mathbb{I}\Psi\text{réd}P}[\Delta E_j] = \left\{ \frac{d}{dE} \left[\Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} \vdots \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] + \Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} \vdots \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right\} \Big|_{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}}, \quad (\text{V.51b})$$

$$\mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^j}^{P'\mathbb{I}\Psi\text{réd}P}[\Delta E_j] = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{I}_{ij;\Gamma_0^{ij}}^{P'\mathbb{I}\Psi\text{réd}P}[\Delta E_j] = 0. \quad (\text{V.51c})$$

Les résultats (V.50) et (V.51) sont formellement assez différents. Cependant, on peut se demander si leurs valeurs sont proches : si l'on déplace continûment vers $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ la valeur de l'énergie $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ de l'état propre $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ de \hat{H}_0 (II.12) (en modifiant \hat{H}_0), il est en effet possible que

$$\mathcal{I}_{ij}^{P'\mathbb{I}\Psi\text{réd}P}[\Delta E_i] \rightarrow \mathcal{I}_{ij}^{P'\mathbb{I}\Psi\text{réd}P}[\Delta E_j] \quad (\text{V.52})$$

(sous condition de régularité). Grâce à la méthode de la particule fantôme, il est possible d'analyser les singularités de (V.50) et de (V.51) pour en déduire que la limite (V.52) est effectivement vérifiée, malgré les expressions formelles très différentes que les résultats (V.50) et (V.51) revêtent ; nous donnons dans la section V/4.5 un calcul détaillé de (V.52).

V/3.6

Conclusion

Le calcul des contributions de self énergie écrantée (*cf.* section V/1.2) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) demandent d'effectuer un certain nombre d'intégrales¹ sur le contour Γ_0 . Nous avons obtenu graphiquement des résultats pour toutes ces intégrations², dans la situation où l'élément de matrice (V.22) qu'elles contiennent est pris entre deux niveaux *non dégénérés* — la structure analytique de cet élément de matrice dans Γ_0 étant différente dans le cas où les énergies de ces deux niveaux sont égales. Il suffit d'appliquer les règles de Feynman des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108) et IV.1 (p. 149) aux diagrammes à particule fantôme que nous avons obtenus comme résultats pour obtenir les expressions mathématiques correspondantes.

¹Il s'agit des intégrales listées dans la section V/2.3 : (V.18) et (V.20).

²Les résultats des intégrations se trouvent dans cette section : (V.27), (V.28), (V.31), (V.35), (V.40), (V.41), (V.50) et (V.51).

Intégrations entre états quelconques

V/4.1

Introduction

V/4.1-a \diamond Limite formelle

Il nous est maintenant nécessaire d'obtenir aussi les intégrales de contour listées dans la section V/2.3 dans le cas où les états $|\mathfrak{n}_0^i\rangle$ et $|\mathfrak{n}_0^j\rangle$ servant à définir l'élément de matrice qu'elles contiennent sont *dégénérés* — maintenant que le cas contraire¹ est étudié. Pour ce faire, nous pourrions en principe employer la démarche que nous venons de suivre dans la section V/3 (pour des états non dégénérés) : lecture puis extraction des pôles contenus dans chacune des parties du contour d'intégration Γ_0 (*cf.* section V/3.1), puis application de la formule de Cauchy (IV.6). Cependant, les expressions mathématiques que nous obtiendrions par une telle procédure ne sont *a priori* pas semblables à celles du cas non dégénéré (que nous avons traité dans la section V/3) : ceci compliquerait les calculs qui mènent à une évaluation numérique de la self énergie écrantée, en multipliant le nombre de cas à prendre en compte dans sa contribution à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c).

Pour rapprocher formellement les résultats des intégrations à calculer (pour $|\mathfrak{n}_0^i\rangle$ et $|\mathfrak{n}_0^j\rangle$ dégénérés ou non), il est en général possible *déduire* le cas dégénéré du cas non dégénéré (section V/3) : en prenant la limite (formelle²) $E_{\mathfrak{n}^i}^{(0)} - E_{\mathfrak{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ des résultats des intégrations de contour pour des états non dégénérés³ [SHABAEV 2000 ; LE BIGOT *et al.* 2001b]. Nous illustrons cette procédure — dans les sections V/4.2–V/4.5 — sur l'ensemble des intégrations de contour considérées dans le cas non dégénéré.

¹Nous avons d'abord présenté (section V/3) le cas de niveaux non dégénérés car l'ordre des pôles dans le contour Γ_0 est alors moins élevé que si l'énergie des états à gauche et à droite d'un diagramme sont dégénérés — puisqu'ils contribuent alors chacun au même pôle — *cf.* p. 140.

²Les énergies des états $|\mathfrak{n}_0^i\rangle$ et $|\mathfrak{n}_0^j\rangle$ sont fixées (par \hat{H}_0 (II.12)) : les expressions que nous avons obtenues sont valables y compris pour des hamiltoniens \hat{H}_0 (éventuellement non physiques) qui donnent des énergies $E_{\mathfrak{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathfrak{n}^j}^{(0)}$ infiniment proches.

³Il n'est pas possible d'atteindre les éléments *diagonaux* ($i = j$) de (V.8) par cette continuité (*i. e.* à partir des éléments de matrice (V.8) tels que $E_{\mathfrak{n}^i}^{(0)} \neq E_{\mathfrak{n}^j}^{(0)}$ calculés dans la section V/3) : comme les états non dégénérés sont tels que $i \neq j$ et que les nombres quantiques des états liés sont *discrets*, on ne peut *a priori* déduire les intégrales (V.8) pour $i = j$ de celles pour $i \neq j$. Nous le ferons cependant lorsque changer un ou plusieurs nombre quantiques des électrons des états $|\mathfrak{n}_0^i\rangle$ et $|\mathfrak{n}_0^j\rangle$ paraît raisonnable — ce qui n'est pas toujours le cas : *cf.* section V/4.3.

V/4.1-b \diamond **Particule fantôme et divergences**

Comme les résultats des intégrations présentés dans la section V/3 sont exprimés à l'aide de diagrammes contenant une ou plusieurs particules fantômes, nous pouvons en connaître les propriétés analytiques (section IV/3). La méthode de la particule fantôme, après nous avoir permis de réaliser des intégrales de contour (V.8), va aussi nous servir à étudier les limites $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ des expressions obtenues.

Nous verrons ainsi que certains termes des expressions obtenues dans la section sur le cas non dégénéré (section V/3) *divergent* lorsqu'on leur impose la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$. Comme les contributions (V.17) et (V.19) de la self énergie à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) sont finies, cela signifie que des *compensations* apparaissent dans leurs termes, même à $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ fixés — puisque $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ est *petit* entre états quasi-dégénérés. Étudier la limite (formelle) $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ dans les résultats obtenus dans la section précédente possède ainsi un intérêt supplémentaire : nous allons pouvoir effectuer analytiquement des compensations qui seraient néfastes aux calculs numériques du hamiltonien effectif.

V/4.1-c \diamond **Plan**

Nous reprenons donc successivement tous les résultats d'intégration de contour que nous avons obtenus dans la section V/3, afin d'en déduire des éléments de matrice sous une forme valable dans tous les cas (dégénérescence ou non des deux états associés). Nous exprimerons souvent les éléments de matrice $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ à une quantité en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$ près (l'erreur commise est nulle pour des états dégénérés et *a priori* faible pour des états quasi-dégénérés) : la liberté donnée par cette petite quantité indéterminée nous permettra d'extraire explicitement la contribution *principale* aux éléments de matrice calculés. Nous serons guidés, pour trouver cette partie principale, par un souci de *simplicité* des formules finales (où nous fixerons le plus possible d'énergies virtuelles sur des considérations physiques), que nous obtiendrons sous une forme qui peut servir de point de départ à des calculs numériques.

Nous obtenons ainsi successivement dans cette section des formules *générales* pour $\langle \mathbf{n}_0^i | \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}_0^j \rangle$ avec $\mathcal{D} = \mathbb{I}, \mathbb{V}, \mathbb{IV}$ et \mathbb{VV} .

Échange de photon

Formules
précédentes

Notre premier exemple de calcul de limite formelle $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ concerne l'échange de photon (section V/3.2). Nous avons obtenu les deux contributions à calculer pour l'échange de photon — (V.20a) et (V.20b) — sous la forme suivante, valable pour eux états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ non dégénérés ; d'après (V.27),

$$\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[1] = \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} + \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}}, \quad (\text{V.53})$$

et d'après (V.28),

$$\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}}. \quad (\text{V.54})$$

Commençons par étudier la limite formelle sur l'expression (V.54), car elle est plus simple que (V.53).

Contribution
(V.54)

Pour effectuer la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ dans (V.54), nous considérons que $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ est fixe : $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$. En d'autres termes, l'énergie $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ en laquelle on prend l'élément de matrice

$$\Delta E_i \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \quad (\text{V.55})$$

peut varier (nous ferons toujours de même pour les autres contributions). Il est donc important de connaître la structure analytique de (V.55) autour de l'énergie limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$. La méthode de la particule fantôme (section IV/3) donne immédiatement pour cette structure

$$(\text{V.55}) = \Delta E_i \times \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}. \quad (\text{V.56})$$

(La notation concise que nous venons d'utiliser — deux barrés pointillés de sommation — est définie dans la section IV/3.3-d.) Nous avons donc simplement

$$\lim_{E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} (\text{V.54}) \equiv \lim_{E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = \left[\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} \text{---} \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}}. \quad (\text{V.57})$$

Cette formule vaut $\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i]$ pour deux états $i \neq j$ tels que $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ (par continuité). Un calcul direct (par la méthode de la particule fantôme)

de $\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i]$ pour les éléments diagonaux ($i = j$) montre que (V.57) est aussi valide¹ dans ce cas.

Afin de relier les expressions que nous avons obtenues pour $\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i]$ dans le cas dégénéré (V.57) et dans le cas non dégénéré (V.54), nous pouvons utiliser le fait que les énergies $E_{\mathbf{n}^1, \dots, s}^{(0)}$ sont quasi-dégénérées : la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ de (V.57) est équivalente à

$$\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[\Delta E_i] = \left[\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})], \quad (\text{V.58})$$

quels que soient les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$. La forme (V.58) possède de nombreux avantages : elle unifie les expressions des cas non dégénéré (V.54) et dégénéré (V.57) et elle sépare une contribution principale (premier terme) d'un terme « petit » (nous reviendrons sur ce terme de correction dans la section V/5).

.....
 Contribution (V.53) La limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ de l'autre contribution de l'échange de photon, (V.53), peut s'obtenir de façon similaire.
 Le premier terme de (V.53),

$$\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}}, \quad (\text{V.59})$$

est un élément de matrice (V.22) pris en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$: nous allons donc chercher l'existence éventuelle d'un pôle en l'autre énergie, $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, afin de savoir si $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ fait diverger (V.59). La méthode de la particule fantôme donne immédiatement pour l'élément de matrice de (V.59) :

$$\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j}. \quad (\text{V.60})$$

Comme (V.59) demande de prendre (V.60) en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, on voit que (V.59) *diverge* sous cette limite.

Cette divergence est compensée par le second terme de (V.53) : la méthode de la particule fantôme donne en effet immédiatement

$$\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} 1 \xrightarrow{\quad} P_2(1) \\ \vdots \\ 2 \xrightarrow{\quad} P_2(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}, \quad (\text{V.61})$$

¹Un tel résultat est raisonnable, bien qu'il n'y ait pas continuité entre les cas $i = j$ et $i \neq j$ (voir la note 3 p. 189) : l'expression mathématique de (V.57) donnée par nos règles de Feynman montre qu'elle ne contient pas de règle de sélection [GRANT 1970] sur les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$, si bien qu'aucune « discontinuité » n'est à attendre lorsque l'on passe de $i \neq j$ à $i = j$ dans (V.57) — ce qui ne sera pas le cas de la self énergie (*cf.* section V/4.3).

si bien qu'avec (V.60),

$$(V.53) = \tag{V.62}$$

$$\frac{1}{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \left(\left[\left(\begin{array}{c} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} - \left[\left(\begin{array}{c} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \right).$$

En prenant la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ de cette expression, on voit simplement apparaître une *dérivée*¹ :

$$\begin{aligned} \lim_{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0} (V.62) &= \lim_{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0} (V.53) \equiv \lim_{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0} \mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[1] \\ &= \frac{d}{dE} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \left(\begin{array}{c} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} \end{aligned} \tag{V.63}$$

De la même façon que pour la contribution (V.58), la limite (V.63) permet de donner une forme unifiée de l'élément de matrice $\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[1]$, valable pour tous les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$:

$$\mathcal{I}_{ij}^{\mp P_2}[1] = \frac{d}{dE} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \left(\begin{array}{c} \text{---} P_2(1) \\ \vdots \\ \text{---} P_2(2) \end{array} \right)_{ij} + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]. \tag{V.64}$$

(Nous rappelons qu'un diagramme de Feynman représente un élément de matrice de la fonction de Green, qui dépend d'un paramètre d'énergie virtuelle E — *cf.* section III/5.2-d.) Cette forme possède les mêmes avantages que l'expression (V.58). Mais de plus, elle exprime analytiquement une importante compensation entre les deux termes de la formule valable pour des états quasi-dégénérés (V.53) — compensation qui serait très pénalisante dans un calcul numérique de (V.53).

V/4.3

Self énergie

Nous pouvons maintenant compléter les calculs effectués pour la self énergie \asymp dans le cas non dégénéré (section V/3.3). Nous avons vu que l'élément de matrice $(P_1' \asymp P_1)_{ij}$ est non nul seulement s'il y a coïncidence exacte entre les états externes (quasi-dégénérés), *i. e.* si $i = j$ et $P_1' = P_1$ — *cf.* (V.31). Pour connaître les intégrales $\mathcal{I}_{ij}^{P_1' \asymp P_1}[1]$ (V.20c) et $\mathcal{I}_{ij}^{P_1' \asymp P_1}[\Delta E_j]$ (V.20d) dans tous les cas, il ne nous reste donc plus qu'à effectuer les intégrations de contour

$$\mathcal{I}_{ii}^{P_1 \asymp P_1}[1] \tag{V.65a}$$

¹Le taux d'accroissement (V.62) possède bien une limite : l'élément de matrice qui le définit est analytique pour E dans Γ_0^i (V.61) et dans Γ_0^j (V.60).

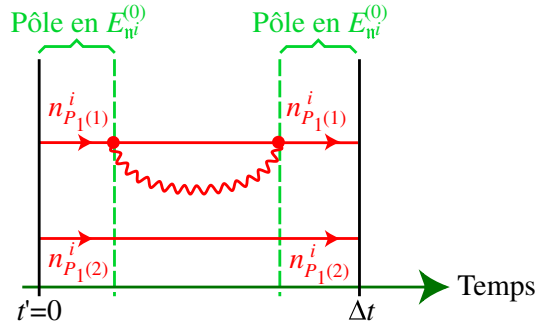
et

$$\mathcal{I}_{ii}^{P_1 \not\leftrightarrow P_1}[\Delta E_i]. \quad (\text{V.65b})$$

Comme des règles de sélection sont en jeu dans l'élément de matrice $(P_1 \not\leftrightarrow P_1)_{ij}$, nous ne pouvons pas déduire (V.65) des résultats (V.32) obtenus dans le cas non dégénéré (voir la note 3, p. 189). Nous appliquons donc une fois de plus la méthode de la particule fantôme de la section IV/3.

V/4.3-a \diamond Structure analytique

On constate rapidement grâce à l'ordonnement temporel



(et grâce à ses variations) que l'élément de matrice $(P_1 \not\leftrightarrow P_1)_{ii}$ employé dans (V.65) — *cf.* (V.16) — ne possède qu'une seule singularité dans le contour Γ_0 : un pôle double en $E = E_n^{(0)}$.

Nous pourrions donc utiliser l'analyticité de la self énergie diagonale dans le contour $\Gamma_0^{\neq ij}$ (défini dans la section V/3.1) :

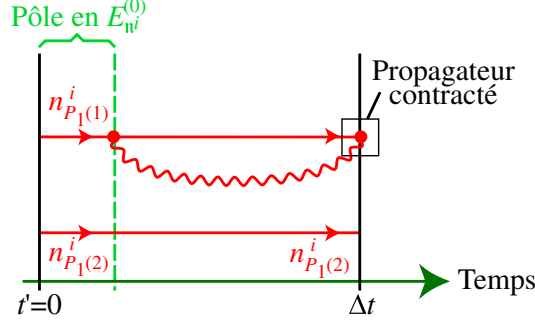
$$\underbrace{\begin{pmatrix} P_1(1) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(1) \\ P_1(2) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(2) \end{pmatrix}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^{\neq ij}} \Big|_{ii}. \quad (\text{V.66})$$

L'extraction du pôle double de $(P_1 \not\leftrightarrow P_1)_{ii}$ se fait en deux étapes, grâce aux techniques de la section IV/3.3-c. Nous pouvons commencer l'extraction d'un ordre de singularité de ce pôle par

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} P_1(1) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(1) \\ P_1(2) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(2) \end{pmatrix} \Big|_{ii} \\ &= \frac{1}{\Delta E_i} \left(\begin{pmatrix} P_1(1) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(1) \\ P_1(2) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(2) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} P_1(1) \Rightarrow \dots \Rightarrow P_1(1) \\ P_1(2) \cdots \cdots P_1(2) \end{pmatrix} \Big|_{ii} \right). \end{aligned} \quad (\text{V.67})$$

Le second terme est analytique dans Γ_0 , grâce à la présence du propagateur fantôme sur toute sa ligne inférieure (voir notre discussion p. 154). Le premier terme contient donc un pôle simple en $E = E_n^{(0)}$ qui va former le pôle double attendu, avec le facteur $1/\Delta E_i$ de (V.67) : les singularités du premier

terme de (V.67) se lisent sur l'ordonnancement temporel



où nous avons contracté comme il se doit le propagateur fantôme. On voit sur ce graphique que le pôle simple en $E = E_{\mathbf{n}}^{(0)}$ est dû aux propagateurs entrant :

$$\left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii} = \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}. \quad (\text{V.68})$$

Nous obtenons donc finalement le développement analytique de la self énergie dans $\Gamma_0^i = \Gamma_0^j$, grâce à (V.68) et à l'analyticité du second terme de (V.67) :

$$\begin{aligned} & \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \\ &= \frac{1}{\Delta E_i^2} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} + \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i}. \end{aligned} \quad (\text{V.69})$$

V/4.3-b \diamond Contributions au hamiltonien effectif

Grâce aux structures analytiques de la self énergie (diagonale) dans les contours $\Gamma_0^{\neq ij}$ (V.66) et $\Gamma_0^i = \Gamma_0^j$ (V.69), nous pouvons calculer immédiatement les intégrations (V.65) :

$$\mathcal{I}_{ii}^{P_1 \rightleftharpoons P_1}[1] = \left\{ \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii} + \left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii} \right\} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}}^{(0)}}. \quad (\text{V.70})$$

et

$$\mathcal{I}_{ii}^{P_1 \rightleftharpoons P_1}[\Delta E_i] = \left(\begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P_1(1) \\ P_1(2) \end{array} \right)_{ii} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}}^{(0)}}. \quad (\text{V.71})$$

V/4.3-c \diamond **Conclusion**

Les résultats d'intégration (V.70) et (V.71) complètent ceux du cas non dégénéré (V.32). Nous achevons ainsi le calcul des intégrales — (V.20c) et (V.20d) — à effectuer pour prendre en compte la *self énergie* $\cancel{\text{z}}$ dans les calculs de self énergie écrantée — cf. section V/2.3-c.

Grâce aux résultats des sections V/3.2, V/3.3 et V/4.2, nous avons aussi terminé le calcul des contributions des diagrammes à *un* photon (V.3) qu'il nous fallait obtenir (V.20).

V/4.4

Vertex

D'après la section V/2.3-b, le diagramme de vertex $\cancel{\text{z}}$ contribue à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) uniquement au travers de l'intégrale $\mathcal{I}_{ij}^{P' \cancel{\text{z}} P}[\Delta E_j]$ (V.18c). Nous l'avons déjà calculée pour deux états i et j *non dégénérés*, dans la section V/3.4.

La valeur de $\mathcal{I}_{ij}^{P' \cancel{\text{z}} P}[\Delta E_j]$ entre deux états *dégénérés* peut s'obtenir de façon immédiate : comme nous l'avons signalé p. 183, plusieurs diagrammes possèdent exactement la même structure analytique dans le contour Γ_0 : l'échange de photon z (V.26) — dont nous venons d'étudier le cas général —, le vertex $\cancel{\text{z}}$ (V.34) — qui nous intéresse ici — et la self énergie écrantée irréductible (V.39) — que nous obtenons entre états quelconques dans la section suivante. Ainsi, nous déduisons directement de la formule (V.58) pour l'intégrale $\mathcal{I}_{ij}^{\text{z} P_2}[\Delta E_i]$ que

$$\begin{aligned} & \mathcal{I}_{ij}^{P' \cancel{\text{z}} P}[\Delta E_j] \\ &= \left[\left(\begin{array}{c} P'(1) \longrightarrow \text{---} \longrightarrow P(1) \\ \text{---} \longleftarrow P(2) \longleftarrow P'(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}j}^{(0)}} + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}j}^{(0)})], \end{aligned} \quad (\text{V.72})$$

où la symétrie¹ des structures analytiques de z (V.26) et de $\cancel{\text{z}}$ (V.34) sous l'échange $i \leftrightarrow j$ nous a permis de prendre l'élément de matrice de (V.72) en $E = E_{\mathbf{n}j}^{(0)}$ — plutôt qu'en $E = E_{\mathbf{n}i}^{(0)}$, comme dans (V.58).

V/4.5

Self énergie écrantée

Pour obtenir la contribution de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) — telle que nous l'avons décrite à l'aide d'intégrales de contour dans la section V/2.3 —, il ne nous reste plus qu'à étendre aux états dégénérés

¹Comme mentionné p. 180 et p. 183, cette structure commune à trois de nos diagrammes est la suivante : un pôle simple dans chacun des contours Γ_0^i et Γ_0^j , et régularité dans le contour restant $\Gamma_0^{\neq ij}$.

les calculs effectués (dans la section V/3.5) pour le diagramme de self énergie écrantée $\overline{\text{P}}$. Nous calculons donc ici les deux intégrales de contour $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}P}[\Delta E_i]$ (V.18a) et $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}P}[\Delta E_j]$ (V.18b) pour des états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ *dégénérés*. Lors des calculs effectués pour le cas non dégénéré dans la section V/3.5, nous avons été amené à distinguer deux contributions distinctes : nous utilisons à nouveau la séparation du diagramme $P'\overline{\text{P}}P$ en une contribution irréductible et une contribution réductible — par laquelle nous terminerons.

V/4.5-a \diamond Contribution irréductible

Comme mentionné p. 183, la contribution *irréductible* (V.38) de la self énergie écrantée $\overline{\text{P}}$ possède la même structure analytique (V.39) que l'échange de photon $\overline{\text{P}}$ et le vertex $\overline{\text{P}}$. Nous obtenons donc immédiatement par analogie avec les résultats obtenus pour le photon (V.58) et le vertex (V.72) que

$$\begin{aligned} & \mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}\text{irr}P}[\Delta E_i] \\ &= \left[\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ \vdots \\ P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \vdots \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})] \end{aligned} \quad (\text{V.73})$$

et de la même façon, par échange $i \leftrightarrow j$, que

$$\begin{aligned} & \mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}\text{irr}P}[\Delta E_j] \\ &= \left[\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ \vdots \\ P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{\text{irr}}} \\ \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \vdots \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]. \end{aligned} \quad (\text{V.74})$$

V/4.5-b \diamond Contribution réductible

Il ne nous reste plus qu'à évaluer la contribution *réductible* aux intégrations $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}P}[\Delta E_i]$ (V.18a) et $\mathcal{I}_{ij}^{P'\overline{\text{P}}P}[\Delta E_j]$ (V.18b) dans le cas de deux états dégénérés. Nous pourrions à cette fin utiliser la méthode de la particule fantôme (section IV/3) mais, comme expliqué dans la section où nous avons traité le cas dégénéré de l'échange de photon (section V/4.2), il est utile de déduire le cas dégénéré du cas non dégénéré (traité pour la self énergie écrantée dans la section V/3.5) : nous pouvons ainsi obtenir des formules valables dans les deux cas et constater des compensations entre termes grâce aux calculs qui mènent à de ces formules.

Dans le cas de deux états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ *non dégénérés*, nous avons obtenu les expressions suivantes pour les intégrales de la section V/2.3 liées à $\overline{\text{P}}$:

d'après (V.50)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\text{red}} P} [\Delta E_i] &= \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \\ &+ \left[\Delta E_i \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \end{aligned} \quad (\text{V.75})$$

et d'après (V.51)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \overleftrightarrow{\text{red}} P} [\Delta E_j] &= \left\{ \frac{d}{dE} \left[\Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \right. \\ &\quad \left. + \Delta E_j \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \end{aligned} \quad (\text{V.76})$$

Pour obtenir ces mêmes intégrales dans le cas de deux états dégénérés, prenons la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ suivant la technique présentée lors de l'étude de l'échange de photon (section V/4.2).

Première
intégration

Commençons par l'étude de cette limite sur la première intégration, (V.75). Le premier terme de (V.75) étant un élément de matrice¹ pris en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$, il nous faut regarder s'il contient des singularités en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, dont on se rapprocherait en prenant la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$. Grâce à la méthode de la particule fantôme, on extrait immédiatement le pôle simple en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ du premier terme de (V.75) :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} \quad (\text{V.77})$$

Pour le second terme de (V.76), qui est un élément de matrice pris en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$, nous devons chercher la présence de pôles en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$; par une dérivation rapide semblable à celle qui a mené à la structure analytique (V.69) de la self énergie, on obtient facilement par la méthode de la particule fantôme

$$\begin{aligned} &\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij} \\ &= \frac{1}{\Delta E_i^2} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} + \frac{1}{\Delta E_i} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{\quad} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\quad} P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^i} \end{aligned} \quad (\text{V.78})$$

¹Nous confondons toujours un diagramme avec l'élément de matrice qu'il représente, suivant la convention (V.22).

Les structures analytiques (V.77) et (V.78), une fois reportées dans la formule (V.75), donnent un résultat d'intégration sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_i] &= \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\dots} P(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \quad (V.79) \\ &+ \frac{1}{E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \left(\left[\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\dots} P(2) \end{array} \right]_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \right. \\ &\quad \left. - \left[\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\dots} P(2) \end{array} \right]_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \right). \end{aligned}$$

Les deux derniers termes de cette expression sont presque égaux (ils le sont à la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$); comme ils proviennent de *chacun* des deux termes de l'expression (V.75) que nous avons obtenue dans le cas non dégénéré, la formule (V.75) contient une importante *compensation numérique* qui pénaliserait tout calcul de $\mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_i]$ par un programme informatique en précision limitée.

La limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ de (V.79) est *finie*, puisqu'on y reconnaît la dérivée d'une fonction régulière¹; nous obtenons donc l'élément de matrice $\mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_i]$, dans le cas général, sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_i] &= \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})] \quad (V.80) \\ &+ \left\{ \begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\dots} P(2) \end{array} \right\}_{ij} + \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} P'(1) \xrightarrow{n_{P(1)}^i} P(1) \\ P'(2) \xrightarrow{\dots} P(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \end{aligned}$$

où nous avons approximé le taux d'accroissement de (V.79) en choisissant arbitrairement de prendre la dérivée en $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$. Nous aurions pu aussi prendre par exemple l'ensemble du terme entre accolades en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$, sans rien changer à la formule (V.80), grâce à la liberté donnée par la petite quantité $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$ que nous n'avons pas précisé. L'expression (V.80) constitue notre résultat final pour l'intégrale $\mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_i]$ (V.18a).

Seconde
intégration

La seule intégrale qu'il nous reste à exprimer dans le cas de deux états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ dégénérés est $\mathcal{I}_{ij}^{P' \overline{\Psi} \text{réd} P}[\Delta E_j]$ (V.76). Suivant la procédure générale que nous avons suivie pour la première intégrale (V.80), nous devons trouver la structure analytique des deux termes de (V.76) *dans le contour* Γ_0^j — puisque les éléments de matrice de (V.76) sont pris en $E = E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}$ et

¹Le raisonnement que nous faisons ici est strictement le même que celui que nous avons mené pour aboutir à une expression générale (V.64) pour l'intégrale $\mathcal{I}_{ij}^{\overline{\Psi} P_2}[1]$: l'élément de matrice dont on prend le taux d'accroissement dans (V.79) est régulier pour E dans Γ_0^i (V.78) et dans Γ_0^j (V.77).

que nous allons imposer $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \rightarrow E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$. La méthode de la particule fantôme (section IV/3) donne immédiatement pour les deux éléments de matrice de (V.76) :

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} \quad (\text{V.81})$$

et

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta E_j} \underbrace{\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij}}_{\text{Régulier dans } \Gamma_0^j} . \quad (\text{V.82})$$

Les divergences en $E \rightarrow E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ de ces éléments de matrice sont exactement compensées par les facteurs ΔE_j de l'expression initiale (V.76) de $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{V} \text{ r} \text{éd} P}[\Delta E_j]$. En reportant ces structures analytiques dans la formule initiale (V.76), on obtient donc immédiatement une formule pour $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{V} \text{ r} \text{éd} P}[\Delta E_j]$, qui est valable aussi pour le cas dégénéré $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ — grâce au comportement régulier des éléments de matrices des structures analytiques (V.81) et (V.82) — :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{V} \text{ r} \text{éd} P}[\Delta E_j] &= \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})] \\ &+ \left\{ \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} + \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} \overset{n_{P(1)}^i}{\bullet} \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{\quad} \\ \xrightarrow{\quad} \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \right\} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} . \end{aligned} \quad (\text{V.83})$$

Nous voyons une fois de plus que chercher la limite $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} \rightarrow 0$ d'un résultat d'intégration obtenu dans le cas non dégénéré permet de simplifier celui-ci, en mettant de plus en évidence les divergences qui y apparaissent quand on prend cette limite (dont on est proche, puisque l'on calcule le hamiltonien effectif (III.39a) entre des états *quasi-dégénérés*).

.....
Conclusion

Nous avons finalement obtenu dans les Eqs. (V.80) et (V.83) les deux dernières intégrations de contour qu'il nous restait à exprimer pour terminer le programme de calcul de la section V/2.3. Comme indication de la cohérence de nos dérivations, on peut remarquer que les intégrales $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{V} \text{ r} \text{éd} P}[\Delta E_i]$ et $\mathcal{I}_{ij}^{P' \mp \mathcal{V} \text{ r} \text{éd} P}[\Delta E_j]$ que nous venons d'obtenir doivent donner le même résultat quand $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ (on intègre exactement la même quantité, d'après (V.16)) ; cette propriété est immédiatement vérifiée par les formules (V.80) et (V.83) que nous venons d'obtenir.

Contribution de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif

V/5.1

Résultats graphiques finals

Pour obtenir la contribution « de self énergie écrantée » (V.1) au hamiltonien effectif (III.50), il ne nous reste plus qu'à regrouper les formules¹ que nous avons trouvées dans la section V/4.

Pour d'arriver à une expression mathématique pour la contribution de self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (cf. section V/2.3), il est plus clair de commencer par regrouper les résultats *graphiques* que nous avons obtenus comme résultat des intégrations de contour à calculer. Nous présentons successivement la contribution des diagrammes à deux photons (V.1) et celle des diagrammes à un photon (V.3).

V/5.1-a \diamond Diagrammes à deux photons

La contribution (V.17) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ des diagrammes à deux photons (V.1) peut s'écrire, d'après les résultats (V.72), (V.73), (V.74), (V.80) et (V.83)

¹Les résultats des intégrations (V.18) et (V.20) que nous cherchions à obtenir dans la section V/2.3 se trouvent dans les formules (V.32), (V.70) et (V.71) — pour $\text{---}\text{---}$, (V.58) et (V.64) — pour $\text{---}\text{---}$, (V.72) — pour $\text{---}\text{---}$, et (V.73), (V.74), (V.80) et (V.83) — pour $\text{---}\text{---}$.

comme

$$\begin{aligned}
 (V.17) = & \hspace{20em} (V.84) \\
 & \sum_{P,P'} \left\{ \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \\ \text{Diagram 2: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } k_{\text{irr}} \end{array} \right] \right. \\
 & + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 3: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } k_{\text{irr}} \\ \text{Diagram 4: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } k_{\text{irr}} \end{array} \right] \\
 & + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 5: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } n_{P(1)}^i \\ \text{Diagram 6: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } n_{P(1)}^i \end{array} \right] \\
 & + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 7: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } n_{P'(1)}^j \\ \text{Diagram 8: } P'(1) \text{ and } P'(2) \text{ with a wavy line between } P(1) \text{ and } P(2) \text{ and } n_{P'(1)}^j \end{array} \right] \Bigg|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \\
 & + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})],
 \end{aligned}$$

où nous avons obtenu certains termes par symétrie, et où nous avons par souci de concision pris tous les éléments de matrice en $E = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ — l'« erreur » commise se trouvant dans la petite quantité $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$.

V/5.1-b \diamond Diagrammes à un photon

La contribution (V.19) à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ des diagrammes à un photon (V.3) s'écrit, grâce à la simplification (V.33) et grâce aux résultats d'intégration (V.58), (V.64), (V.70) et (V.71), comme

$$\begin{aligned}
 (V.19a) = & \hspace{20em} (V.85a) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{P_1, P_2} \left\{ \left[\frac{d}{dE} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \left(\begin{array}{c} \text{Diagram 9: } P_2(1) \text{ and } P_2(2) \text{ with } 1 \text{ and } 2 \\ \text{Diagram 10: } P_2(1) \text{ and } P_2(2) \text{ with } 1 \text{ and } 2 \end{array} \right) \right] \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 11: } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \text{ with } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \\ \text{Diagram 12: } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \text{ with } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \end{array} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \right. \\
 & + \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 13: } P_2(1) \text{ and } P_2(2) \text{ with } 1 \text{ and } 2 \\ \text{Diagram 14: } P_2(1) \text{ and } P_2(2) \text{ with } 1 \text{ and } 2 \end{array} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \\
 & \times \left\{ \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} \text{Diagram 15: } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \text{ with } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \\ \text{Diagram 16: } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \text{ with } P_1(1) \text{ and } P_1(2) \end{array} \right) \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \right. \\
 & \left. + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})] \right\} \\
 & + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})].
 \end{aligned}$$

Afin d'expliciter les compensations de (V.85a) avec la contribution (V.84) des diagrammes à deux photons, il est pratique d'effectuer un changement de variable sur les permutations¹ P_1 et P_2 ; nous utilisons les mêmes notations P et P' que pour les permutations de (V.84), avec $P_2 = PP'$ et $P_1 = P$, on a directement d'après (V.85a) que

$$\begin{aligned}
 (V.19a) = & \hspace{20em} (V.85b) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{P, P'} \left\{ \left[\frac{d}{dE} \Big|_{E=E_{n^i}^{(0)}} \left(\begin{array}{c} \text{---} P'(1) \text{---} P(1) \\ \text{---} P'(2) \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \left[\left(\begin{array}{c} \text{---} P'(1) \text{---} P'(1) \\ \text{---} P'(2) \text{---} P'(2) \end{array} \right)_{jj} \right] \Big|_{E=E_{n^j}^{(0)}} \right. \\
 & \quad + \left. \left[\left(\begin{array}{c} \text{---} P'(1) \text{---} P(1) \\ \text{---} P'(2) \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{n^i}^{(0)}} \right. \\
 & \quad \times \left. \left\{ \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} \text{---} P'(1) \text{---} P'(1) \\ \text{---} P'(2) \text{---} P'(2) \end{array} \right)_{jj} + \left(\begin{array}{c} \text{---} P'(1) \text{---} P'(1) \\ \text{---} P'(2) \text{---} P'(2) \end{array} \right)_{jj} \right\} \Big|_{E=E_{n^j}^{(0)}} \right\} \\
 & + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})].
 \end{aligned}$$

(Dans la forme (V.85a), les électrons subissant l'échange de photon \mp sont permutés si $P_2 \neq \text{Id}$, alors que dans la forme (V.85b), ils le sont si $P \neq P'$.) Le dernier élément de matrice (V.19b) que nous devons calculer pour obtenir la contribution de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (cf. section V/2.3) peut se déduire immédiatement de (V.85b) par symétrie.

Les règles de Feynman pour la particule fantôme (table IV.1, p. 149), associées aux règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps (cf. p. 108), donnent immédiatement des expressions mathématiques pour les éléments de matrice (V.84) et (V.85b) — qui forment, avec (V.19b), la contribution de self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$. Nous consacrons les sections V/5.2 et V/5.3 à l'obtention de formules explicites et simplifiées pour la contribution de la self énergie écrantée au hamiltonien effectif, à partir des résultats graphiques (V.84) et (V.85b).

V/5.2

Résultats formels pour les diagrammes à un photon

Afin d'illustrer simplement le passage d'un élément de matrice avec particule fantôme à son expression formelle, nous commençons par exprimer mathématiquement la contribution (V.85b) des diagrammes à un photon (V.3).

¹Nous rappelons que les permutations P_1 et P_2 (permutations de $\{1, 2\}$) permettent d'éventuellement échanger les électrons externes (cf. section III/5.2-c).

V/5.2-a \diamond **Opérateurs élémentaires**

Pour ne pas s'encombrer d'expressions formelles trop longues, il est pratique [SHABAEV and FOKEEVA 1994 ; ARTEMYEV *et al.* 2000] de définir un « opérateur d'échange de photon » I :

$$\begin{aligned} \langle ab|I(\omega)|cd\rangle & \quad (V.86) \\ \equiv -e^2 \int d^3\mathbf{x}_1 \int d^3\mathbf{x}_2 [\phi_a^\dagger(\mathbf{x}_1)\alpha^\mu\phi_c(\mathbf{x}_1)][\phi_b^\dagger(\mathbf{x}_2)\alpha^\nu\phi_d(\mathbf{x}_2)]H_{\mu\nu}(\omega; \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \end{aligned}$$

où l'on reconnaît le propagateur photonique H (III.61b) et des bi-spineurs propres de Dirac ϕ (*cf.* section II/1.2-a), et où nous avons utilisé des brackets $\langle || \rangle$ (*cf.* section III/4.1-b) pour rappeler que l'opérateur I agit sur des états de Dirac (par opposition à des états de Fock). On peut représenter la définition (V.86) de façon imagée¹ comme

$$\begin{array}{ccc} d & \rightleftarrows & b \\ & \omega & \\ c & \rightleftarrows & a \end{array} \quad (V.87)$$

Notons dès à présent une identité de symétrie sur cet opérateur d'échange de photon, qui nous permettra d'effectuer des changements de variable sur l'énergie ω : en jauge de Feynman, on a [ARTEMYEV *et al.* 2000]

$$I(\omega) = I(-\omega) \quad (V.88)$$

(que l'on peut montrer immédiatement grâce au propagateur photonique (III.65) dans la jauge de Feynman).

L'opérateur d'échange de photon I permet de définir [YEROKHIN *et al.* 1999a] un opérateur de self énergie Σ :

$$\begin{aligned} \langle a|\Sigma(p)|b\rangle & \equiv \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \sum_k \frac{\langle ak|I(\omega)|kb\rangle}{\varepsilon_k^- - (p - \omega)} \quad (V.89) \\ & = -\frac{e^2}{2\pi i} \int d\omega \int d^3\mathbf{x}_1 \int d^3\mathbf{x}_2 \phi_a^\dagger(\mathbf{x}_1)\alpha^\mu G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; p - \omega)\alpha^\nu\phi_b(\mathbf{x}_2) \\ & \quad \times H_{\mu\nu}(\omega; \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \end{aligned}$$

où la sommation se fait sur tous les états de Dirac k , où l'énergie virtuelle ω du photon peut prendre toutes les valeurs possibles et où p représente une énergie virtuelle entrante. On peut représenter de façon imagée la définition (V.89) de l'opérateur de self énergie Σ comme

$$\begin{array}{ccc} & \text{---} & \\ & \text{---} & \\ b & \rightleftarrows & a \\ & p & \\ & \text{---} & \\ & \text{---} & \end{array}$$

¹Le diagramme (V.87) ne représente *pas* un élément de matrice de la fonction de Green, contrairement à tous les diagrammes que nous avons manipulé jusqu'à maintenant. Nous ne ferons d'ailleurs pas usage de cette représentation par la suite.

Notons que la règle de sélection sur la self énergie mentionnée dans la section V/3.3-a provient directement de la règle de sélection suivante sur l'opérateur Σ (V.89), qui dérive¹ de l'invariance par rotation du champ du noyau : si les états de Dirac a et b ne possèdent pas exactement les mêmes nombres quantiques de moment cinétique, projection du moment cinétique et parité, alors $\langle a | \Sigma(p) | b \rangle = 0$. Cette règle nous sera utile par la suite (cf. section V/5.3-b).

Grâce aux opérateurs élémentaires (V.86) et (V.89), nous pouvons exprimer facilement (V.85b). Comme les seules différences entre les diagrammes avec et sans particule fantôme sont situées mathématiquement dans les *dénominateurs* de certains propagateurs électroniques (voir les règles de Feynman des tables des pages 108 et 149, ainsi que la section IV/3.), nous allons procéder comme suit : dans un premier temps, nous allons écrire l'expression mathématique donnée par les règles de Feynman pour les diagrammes de (V.85b), mais où les propagateurs fantômes sont *remplacés par des propagateurs électroniques* ; nous en déduisons ensuite immédiatement des formules pour tous les éléments de matrice de (V.85b), simplement en modifiant certains dénominateurs électroniques pour faire apparaître les propagateurs fantômes — cf. section IV/3.3-d.

V/5.2-b \diamond Diagrammes sans particule fantôme

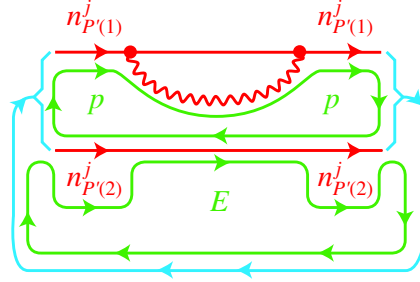
Les règles de Feynman des tables III.1 et III.2 (cf. p. 108) et de la p. 149 donnent les expressions suivantes² pour les diagrammes de (V.85b) (dans leur version sans propagateur fantôme) :

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{c} P'(1) \Rightarrow \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} P'(1) \\ P'(2) \Rightarrow \text{---} \text{---} P'(2) \end{array} \right)_{jj} \quad (V.90a) \\
 & = -\frac{1}{2\pi i} \int dp \langle n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \rangle \left[\frac{1}{(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p)^2} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p)} \right],
 \end{aligned}$$

¹Il est possible de prouver le résultat que nous mentionnons à l'aide de techniques classiques de calculs angulaires avec les bi-spineurs de Dirac [GRANT 1970].

²Nous rappelons que les règles de Feynman donnent des contributions aux éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green, comme indiqué dans la table IV.1, p. 149 et donné explicitement par la notation (V.22).

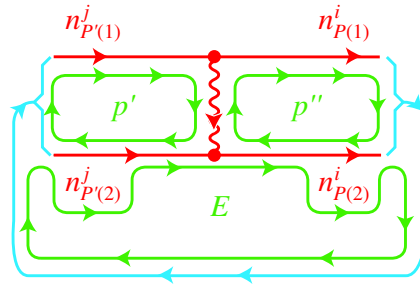
que l'on peut déduire¹ rapidement des règles de Feynman grâce au diagramme de flux d'énergie suivant (cf. section IV/3.3-a) :



(où l'on voit l'énergie virtuelle p entrer dans la self énergie et l'énergie totale E entrer dans le diagramme) et

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \\
 &= -\frac{(-1)^{PP'}}{(2\pi i)^2} \int dp' dp'' \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p' - p'') | n_{P(1)}^j n_{P(2)}^j \succ \\
 & \times \left[\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^j}^- - p'} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}^j}^- - (E - p')} \right] \\
 & \times \left[\frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^i}^- - p''} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}^i}^- - (E - p'')} \right], \tag{V.90b}
 \end{aligned}$$

où nous avons utilisé les énergies virtuelles du diagramme de flux d'énergie suivant :



(où l'on voit par exemple que l'énergie virtuelle du photon est $p' - p''$ et que l'énergie virtuelle du propagateur en bas à gauche vaut $E - p'$). Les éléments de matrice (V.90) dépendent de l'énergie virtuelle E , conformément

¹Nous rappelons que l'état de Dirac du i -ème électron de l'état de Fock $|\mathbf{n}^j\rangle$ est noté n_i^j — cf. (III.34).

à notre convention (V.22) de représentation des éléments de matrice par des diagrammes.

Bien que nous ayons utilisé pour (V.90) le raccourci permis par les opérateurs d'échange de photon (V.86) et de self énergie (V.89), les expressions (V.90) sont assez lourdes à manipuler ; on voit ici l'intérêt de la méthode graphique que j'ai introduite dans la section IV/3 et que l'on peut utiliser jusqu'à ce que l'on ait besoin d'explicitier mathématiquement les éléments de matrice du hamiltonien effectif.

V/5.2-c \diamond Diagrammes avec particule fantôme

Nous avons vu dans la présentation de la méthode de la particule fantôme (section IV/3) que celle-ci a pour effet de modifier certains dénominateurs de propagateurs électroniques en (-1) — cf. table IV.1, p. 149. Prenons comme exemple de cette procédure l'un des diagrammes de l'expression (V.85b) qu'il nous faut calculer,

$$\left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \right) \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \end{array} \begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \right)_{jj} \quad (\text{V.91})$$

Les deux dénominateurs des propagateurs barrés à gauche par le symbole de sommation (cf. section IV/3.3-d) transforment simplement les deux dénominateurs correspondant de (V.90a) selon

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}}^- - p} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(2)}}^- - (E - p)} \\ & \rightarrow \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}}^- - (E - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}}^- - p} \frac{1}{(-1)} \right] \end{aligned} \quad (\text{V.92a})$$

(comparer les règles de Feynman des tables III.1 (p. 108) et IV.1 (p. 149)). De la même façon, le propagateur fantôme à droite de (V.91) s'obtient en appliquant la substitution de dénominateur

$$\frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}}^- - p} \rightarrow \frac{1}{(-1)} \quad (\text{V.92b})$$

dans (V.90a).

On obtient donc, après avoir effectué les substitutions (V.92) dans (V.90a) une expression pour le terme (V.91) de la contribution (V.85b)

à calculer :

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \left| \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \right. \begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \right)_{jj} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}j}^{(0)}} \\
 &= -\frac{1}{2\pi i} \int dp \prec n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \succ \times \frac{1}{(-1)} \\
 & \times \left[\frac{1}{(-1)} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E-p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{(-1)} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}j}^{(0)}} .
 \end{aligned} \tag{V.93}$$

Tous les autres termes à exprimer formellement — termes de (V.85b) — s’obtiennent de même aisément à partir des expressions (V.90), par simples remplacements de dénominateurs.

V/5.2-d \diamond Expression mathématique

L’expression (V.85b) que nous devons exprimer formellement pour obtenir la contribution des diagrammes à un photon s’obtient suivant la même démarche que celle que nous venons d’appliquer ; on aboutit ainsi

immédiatement, d'après (V.85b), à

$$\begin{aligned}
 (V.19a) &= -\frac{1}{2} \sum_{P,P'} \frac{(-1)^{PP'}}{(2\pi i)^3} \\
 &\times \int dp dp' dp'' \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i |I(p' - p'')| n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \succ \prec n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \succ \\
 &\times \left\{ \left[\frac{d}{dE} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \left(\left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p')} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p' (-1)} \right] \right. \right. \right. \\
 &\quad \times \left. \left. \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P(2)}^i}^- - (E - p'')} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^i}^- - p'' (-1)} \right] \right) \right] \\
 &\quad \times \frac{1}{(-1)} \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p (-1)} \right] \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \\
 &\quad + \left(\left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p')} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p' (-1)} \right] \right. \\
 &\quad \times \left. \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P(2)}^i}^- - (E - p'')} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^i}^- - p'' (-1)} \right] \right) \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^i}^{(0)}} \\
 &\quad \times \left(\frac{1}{(-1)} \frac{d}{dE} \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p (-1)} \right] \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left[\frac{1}{(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p)^2 (-1)} \right] \right) \Big|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \right\} \\
 &+ \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]
 \end{aligned} \tag{V.94}$$

où nous avons conservé la structure de la formule de départ (V.85b) et avons évité d'utiliser des simplifications mathématiques qui obscurciraient le lien entre la forme graphique (V.85b) et l'expression formelle correspondante (V.94).

V/5.2-e \diamond Énergies virtuelles fixées

On voit que les calculs formels qui restent à effectuer sur (V.94) sont très simples puisqu'ils ne demandent que de manipuler que des fractions rationnelles. Toutefois, il est utile de simplifier la forme des résultats que l'on obtient en *fixant certaines énergies virtuelles*. Ceci peut être réalisé en faisant apparaître des fonctions delta de Dirac (éventuellement dérivées une ou plusieurs fois).

Prenons l'exemple du diagramme (V.93), pour lequel nous allons montrer que l'énergie virtuelle p qui entre dans la self énergie de (V.93) peut

être fixée à une valeur bien particulière — qui s'avère naturellement être l'énergie $\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}$ de l'état propre de Dirac $\phi_{n_{P'(1)}^j}$ qui subit le processus de self énergie dans (V.93). Ce résultat s'obtient en évaluant le facteur dû aux propagateurs entrants de (V.93) — *cf.* (V.92a) — de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{(-1)} \right] \Bigg|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \\
 &= \frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{(-1)} \\
 &= \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} (1 + i0) - p} - \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} (1 - i0) - p} \\
 &= -2\pi i \delta(p - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}), \tag{V.95}
 \end{aligned}$$

où nous avons fait apparaître un fonction delta de Dirac en utilisant successivement : la définition (III.63) des énergies tournées d'un angle infinitésimal, le fait que les énergies de Dirac des électrons sont positives (d'où $i0 \times \varepsilon_{n_{P'(1)}^j} = i0$, d'après la définition de la section III/2.3-b), ainsi que l'identité $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} = \varepsilon_{n_{P'(1)}^j} + \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}$ sur l'énergie totale de l'état $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ (nous rappelons que P' est une permutation de $\{1, 2\}$ — *cf.* section III/5.2-c). Grâce à (V.95), nous pouvons ainsi faire apparaître explicitement l'énergie $p = \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}$ dans l'opérateur de self énergie de (V.93) — c'est-à-dire dans la cinquième ligne de notre expression à évaluer (V.94).

En cherchant à fixer le plus d'énergies virtuelles possible dans (V.94) — et dans toutes les expressions que j'ai rencontrées au cours de ma pratique de la méthode de la particule fantôme —, j'ai été amené à utiliser deux résultats simples supplémentaires.

Le premier résultat est nécessaire dans la situation suivante. Les deux derniers diagrammes de self énergie contenus dans (V.85b) ont donné à l'expression formelle (V.94) les facteurs

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{(-1)} \frac{d}{dE} \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E - p)} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{(-1)} \right] \right. \\
 & \quad \left. + \left[\frac{1}{(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - p)^2} \frac{1}{(-1)} \right] \right) \Bigg|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \\
 &= \frac{1}{(p - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^+)^2} - \frac{1}{(p - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^-)^2} \tag{V.96}
 \end{aligned}$$

où j'introduis par souci de concision une notation symétrique de celle de ε^- (III.63) :

$$\varepsilon^+ \equiv \varepsilon(1 + i0),$$

qui représente une rotation infinitésimale dans le sens positif. On reconnaît dans le dernier membre de (V.96) une généralisation simple du premier membre de l'identité

$$\frac{1}{x - i0} - \frac{1}{x + i0} = 2\pi i \delta(x) \quad (\text{V.97})$$

que nous avons utilisée pour fixer une énergie (V.95) : par dérivation de (V.97), on obtient

$$\frac{1}{(x - i0)^k} - \frac{1}{(x + i0)^k} = \frac{(-1)^k}{(k-1)!} 2\pi i \delta^{(k)}(x). \quad (\text{V.98})$$

Grâce à (V.98) et à (V.96), nous fixerons une énergie virtuelle de plus dans l'expression (V.94) à calculer.

Le second résultat que j'ai été amené à utiliser permet de forcer certaines énergies virtuelles à prendre une valeur physiquement raisonnable ; cela a pour avantage de donner des expressions relativement simples pour les éléments de matrice du hamiltonien effectif (III.39a) et d'extraire formellement les contributions principales à ces éléments de matrice (tout en reléguant à des termes en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$ les contributions négligeables). Pour en discuter, prenons l'exemple du facteur

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{(-1) \varepsilon_{n_{P(2)}}^-} \frac{1}{-(E - p'')} + \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}}^-} \frac{1}{p'' (-1)} \right] \Bigg|_{E=E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}} \\ &= \frac{-1}{p'' - (E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} - \varepsilon_{n_{P(2)}}^i) - i0} + \frac{1}{p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}}^i + i0} \end{aligned} \quad (\text{V.99})$$

que l'on trouve¹ dans l'expression à calculer (V.94). L'expression (V.99) est *presque* une fonction delta de Dirac : en effet, comme les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ sont quasi-dégénérés (ou dégénérés), $E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} \simeq E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$ si bien que $E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} - \varepsilon_{n_{P(2)}}^i \simeq E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} - \varepsilon_{n_{P(2)}}^j = \varepsilon_{n_{P(1)}}^j$, ce qui permet de reconnaître la forme (V.97) d'un delta de Dirac à partir de (V.99). Mathématiquement, nous avons exactement — grâce à la remarque que nous venons de faire — que

$$\begin{aligned} & \frac{-1}{p'' - (E_{\mathbf{n}^j}^{(0)} - \varepsilon_{n_{P(2)}}^i) - i0} + \frac{1}{p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}}^i + i0} \\ &= -2\pi i \delta(p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}}^i) + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]. \end{aligned} \quad (\text{V.100})$$

¹Ce facteur provient du symbole barré de sommation sur les électrons sortant de l'échange de photon, dans (V.94), une fois la dérivation $\frac{d}{dE}$ effectuée.

Cette approximation est physiquement justifiée par le fait que l'énergie virtuelle p'' traverse le propagateur lié à l'électron $\phi_{n_{P(1)}^i}$, dans (V.90b) : il est donc raisonnable qu'elle puisse être fixée à l'énergie propre $\varepsilon_{n_{P(1)}^i}$.

Grâce aux résultats (V.98) et (V.100) on obtient facilement une expression plus simple pour (V.94) :

$$\begin{aligned}
 (V.19a) &= -\frac{1}{2} \sum_{P,P'} \frac{(-1)^{PP'}}{2\pi i} \\
 &\times \int dp dp' dp'' \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p' - p'') | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \succ \prec n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \succ \\
 &\times \left\{ \left[\frac{1}{(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^+)^2} \delta(p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) + \delta(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) \frac{1}{(p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}^+)^2} \right] \delta(p - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) \right. \\
 &\quad \left. - 2\pi i \delta(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) \delta(p'' - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) \delta'(p - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) \right\} \\
 &+ \mathcal{O}[\alpha^2 (E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})]. \tag{V.101}
 \end{aligned}$$

V/5.2-f \diamond Résultat final

Pour la simplifier encore plus, nous effectuons le changement de variable $p'' \rightarrow \varepsilon_{n_{P(1)}^i} + \varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - p'$, qui permet de rapprocher les deux premiers termes de (V.101) — et qui servira à reconnaître des annulations entre (V.101) et la contribution (V.84) des diagrammes à deux photons. En utilisant de plus la symétrie (V.88), on obtient immédiatement grâce à (V.101) que

$$\begin{aligned}
 (V.19a) &= \\
 &-\frac{1}{2} \sum_{P,P'} \frac{(-1)^{PP'}}{2\pi i} \int dp' \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \succ \\
 &\quad \times \prec n_{P'(1)}^j | \Sigma(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j \succ \left[\frac{1}{(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^+)^2} + \frac{1}{(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^-)^2} \right] \\
 &-\frac{1}{2} \sum_{P,P'} (-1)^{PP'} \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \succ \\
 &\quad \times \prec n_{P'(1)}^j | \Sigma'(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j \succ \\
 &+ \mathcal{O}[\alpha^2 (E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})], \tag{V.102}
 \end{aligned}$$

où $\Sigma'(p)$ est simplement la dérivée de l'opérateur de self énergie (V.89) par rapport à l'énergie virtuelle p qui le parcourt. Le résultat (V.102) est une

forme simplifiée¹ de celui qui peut être trouvé dans LE BIGOT *et al.* [2001b, Eq. (11)]. L'expression (V.102) contient de nombreuses énergies virtuelles fixées. Ainsi par exemple l'opérateur Σ et sa dérivée sont appliqués à l'énergie de l'électron de Dirac $n_{P'(1)}^j$ qui est attaché à la self énergie dans les diagrammes de (V.85b). On reconnaît de plus dans $I(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \varepsilon_{n_{P(1)}^i})$ l'énergie laissée au photon par un électron $n_{P'(1)}^j$ qui se transforme en électron $n_{P(1)}^i$ — voir par exemple le diagramme² de (V.90b).

Nous prenons l'expression (V.102) comme forme *finale*³ de la contribution (V.19a) des diagrammes à un photon au hamiltonien effectif (III.39a). En effet, elle *compense* directement certains termes de la contribution réductible des diagrammes à *deux* photons, vers laquelle nous nous tournons maintenant — ce qui terminera l'étape d'obtention de *formules* pour les éléments de matrice listés dans la section V/2.3.

V/5.3

Résultats formels pour les diagrammes à deux photons

Les principes que nous venons de présenter dans la section V/5.2 suffisent à obtenir une formule pour la contribution (V.84) des diagrammes à deux photons.

V/5.3-a \diamond Diagrammes sans particule fantôme

Comme nous l'avons fait pour les diagrammes à un photon dans la section V/5.2-b, il est pratique de trouver des expressions pour les diagrammes utilisés dans (V.84), mais où les particules fantômes ont été remplacées par des propagateurs électroniques (car on peut obtenir ensuite n'importe quel diagramme à particule fantôme qui en dérive par simple modification de quelques dénominateurs). Les règles de Feynman (*cf.* p. 108) permettent

¹Nous n'avons pas inclus dans (V.102) la contribution symétrique (V.19b), qui se trouve dans la référence citée. D'autre part, nous n'avons pas précisé dans (V.102) d'expression pour les quantités négligées, qui sont explicitées dans l'article cité.

²Notons que si les énergies non perturbées $E_{n^i}^{(0)}$ et $E_{n^j}^{(0)}$ sont quasi-dégénérées, une *autre* façon raisonnable de fixer l'énergie dans le diagramme de (V.90b) consiste à prendre pour énergie du photon celle laissée par un électron $n_{P'(2)}^j$ qui se transforme en électron $n_{P(2)}^i$, soit $I(\varepsilon_{n_{P'(2)}^j} - \varepsilon_{n_{P(2)}^i}) \neq I(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \varepsilon_{n_{P(1)}^i})$.

³La contribution symétrique (V.19b) des diagrammes à un photon peut se déduire immédiatement de (V.102).

d'obtenir immédiatement que

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \overset{k}{\bullet} \text{---} \bullet \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \quad (\text{V.103a}) \\
 &= (-1)^{PP'} \frac{-1}{(2\pi i)^2} \int dp dp' \prec n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i |I(p-p')| k n_{P'(2)}^j \succ \\
 & \quad \times \prec k | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \succ \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^i}^- - p'} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}^i}^- - (E-p')} \\
 & \quad \times \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{[\varepsilon_k^- - p]} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E-p)}
 \end{aligned}$$

et que

$$\begin{aligned}
 & \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ P'(2) \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} \overset{i_1}{\bullet} \text{---} \bullet \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} P(1) \\ P(2) \end{array} \right)_{ij} \quad (\text{V.103b}) \\
 &= (-1)^{PP'} \frac{-1}{(2\pi i)^3} \int dp dp' d\omega \prec i_1 n_{P(1)}^i |I(\omega)| n_{P'(1)}^j i_2 \succ \\
 & \quad \times \prec i_2 n_{P(2)}^i |I(p-p')| i_1 n_{P'(2)}^j \succ \frac{1}{\varepsilon_{i_1}^- - p} \frac{1}{\varepsilon_{i_2}^- - p'} \\
 & \quad \times \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(1)}^i}^- - p'} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P(2)}^i}^- - (E-p')} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^- - p} \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(2)}^j}^- - (E-p)}
 \end{aligned}$$

(où nous avons sélectionné les états de Dirac individuels i_1 et i_2 dans les propagateurs électroniques intermédiaires, afin de pouvoir utiliser les opérateurs standard de self énergie (V.89) et d'échange de photon (V.86) — il faut sommer ces variables sur tous les états de Dirac pour obtenir la contribution du diagramme de vertex (V.1b)).

V/5.3-b \diamond Expression mathématique

On peut facilement obtenir grâce aux expressions formelles (V.103) une version mathématique de la contribution (V.84) des diagrammes à deux photons — obtenue d'abord sous forme graphique. De plus, grâce aux techniques présentées dans la section V/5.2-e, il est facile de fixer certaines énergies virtuelles — plutôt que de conserver des formules avec les intégrations de (V.103). Nous pouvons ainsi donner les contributions des termes successifs de (V.84) à calculer.

.....
 Vertex Pour le *vertex*, les symboles barrés de sommation sur les propagateurs fantômes externes du diagramme de (V.84) donnent rapidement grâce à

(V.97) et à (V.100)

$$\begin{aligned}
 & \sum_{P,P'} \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ \hline P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \hline P(2) \end{array} \right)_{ij} \Big|_{E=E_{\mathbf{n}}^{(0)}} \\
 &= \sum_{P,P'} (-1)^{PP'} \frac{-1}{2\pi i} \sum_{i_1, i_2} \langle i_2 n_{P(2)}^i | I(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) | i_1 n_{P'(2)}^j \rangle \quad (V.104) \\
 & \quad \times \int d\omega \frac{\langle i_1 n_{P(1)}^i | I(\omega) | n_{P'(1)}^j i_2 \rangle}{[\varepsilon_{i_1}^- - (\varepsilon_{n_{P(1)}^i} - \omega)] [\varepsilon_{i_2}^- - (\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \omega)]} \\
 & \quad + \mathcal{O}[\alpha^2 (E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]
 \end{aligned}$$

— qui est identique au résultat publié dans LE BIGOT *et al.* [2001b, Eq. (13)].

.....
 Contribution réductible La contribution *irréductible* de (V.84) — qu'il nous faut exprimer analytiquement — peut aussi s'écrire¹

$$\sum_{\substack{k_{\text{irr}} \\ (\varepsilon_{n_{P'(2)}^j} + \varepsilon_{k_{\text{irr}}}) \text{ hors de } \Gamma_0}} \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ \hline P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \hline P(2) \end{array} \right)_{ij} \quad (V.105)$$

$$= \sum_{\varepsilon_{k_{\text{irr}}} \neq \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}} \left(\begin{array}{c} P'(1) \\ \hline P'(2) \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} P(1) \\ \hline P(2) \end{array} \right)_{ij}, \quad (V.106)$$

d'après la formule (V.103a) et grâce au fait que les niveaux k_{irr} tels que $\varepsilon_{k_{\text{irr}}} + \varepsilon_{n_{P'(2)}^j}$ est dans le contour Γ_0 donnent $\langle k | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \rangle = 0$ sauf si k_{irr} coïncide avec l'état de Dirac $n_{P(2)}^i$ (voir la discussion de la section V/3.3-b et la règle de sélection sur Σ dans la section V/5.2-a, ou encore LE BIGOT *et al.* [2001b]). On obtient rapidement grâce à l'expression formelle (V.103a) et grâce aux résultats de la section V/5.2-e une expression

¹Cette forme possède l'avantage de faire apparaître la fonction de Green réduite, qui peut servir aux calculs numériques [HYLTON 1984 ; INDELICATO and MOHR 1991, 2001].

pour la partie *irréductible* de (V.84) [LE BIGOT *et al.* 2001b] :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{P,P'} \overline{\sum}_{\varepsilon_{k_{\text{irr}}} \neq \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}} \left(\begin{array}{c} P'(1) \text{---} \text{---} P(1) \\ P'(2) \text{---} \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \quad (V.107) \\
 & = \sum_{P,P'} (-1)^{PP'} \overline{\sum}_{\varepsilon_{k_{\text{irr}}} \neq \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}} \langle n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j} - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) | k_{\text{irr}} n_{P'(2)}^j \rangle \\
 & \quad \times \frac{1}{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}} \langle k_{\text{irr}} | \Sigma(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j \rangle \\
 & \quad + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})]
 \end{aligned}$$

où les énergies virtuelles de (V.103a) ont été fixées (en particulier grâce aux symboles barrés de sommation contenus dans le diagramme) à des énergies physiquement raisonnables, d'après le diagramme de (V.107).

La contribution symétrique de celle de (V.107) (avec la self énergie qui agit sur l'un des électrons *sortants*) contenue dans (V.84) peut se déduire immédiatement de (V.107) [LE BIGOT *et al.* 2001b].

.....
 Contribution
 réductible

Il ne nous reste plus qu'à exprimer la contribution *réductible* contenue dans l'élément de matrice (V.84) du hamiltonien effectif. On obtient grâce à l'expression (V.103a) et aux résultats (V.98) et (V.100) que

$$\begin{aligned}
 & \left[\left(\begin{array}{c} P'(1) \text{---} \text{---} P(1) \\ P'(2) \text{---} \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} + \frac{d}{dE} \left(\begin{array}{c} P'(1) \text{---} \text{---} P(1) \\ P'(2) \text{---} \text{---} P(2) \end{array} \right)_{ij} \right] \Big|_{E=E_{n^j}^{(0)}} \\
 & = \frac{(-1)^{PP'}}{2\pi i} \int dp' \langle n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \rangle \\
 & \quad \times \langle n_{P'(1)}^j | \Sigma(\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}) | n_{P'(1)}^j \rangle \frac{1}{(p' - \varepsilon_{n_{P'(1)}^j}^-)^2} \quad (V.108) \\
 & \quad + (-1)^{PP'} \frac{d}{dp} \Big|_{\varepsilon_{n_{P'(1)}^j}} \left[\langle n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p - \varepsilon_{n_{P(1)}^i}) | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \rangle \right. \\
 & \quad \left. \times \langle n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \rangle \right] \\
 & \quad + \mathcal{O}[\alpha^2(E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})].
 \end{aligned}$$

On voit clairement sur cette expression que la contribution de la self énergie écrantée *réductible* (V.108) contient des termes très semblables à ceux de la contribution (V.102) des diagrammes à *un* photon (V.3) — et donc du même ordre de grandeur, ce qui est attendu d'après l'expression (III.51c) de $H_{\text{eff}}^{(2)}$, qui contient toutes les contributions d'ordre α^2 (*i. e.* dues au total à deux photons) au hamiltonien effectif.

La contribution symétrique de celle de (V.108) que l'on trouve dans (V.84) s'obtient immédiatement à partir de la formule (V.108).

Total des
contribu-
tions
réductibles
et à un
photon

Les contributions réductibles (V.108) et à un photon (V.102) se *compensent* partiellement — et il est donc important de les calculer simultanément. Nous donnons ici pour référence leur contribution totale à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) (qu'il faut sommer sur P et P' , d'après (V.84)) :

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{P,P'} (\text{V.108}) \right) + (\text{V.102}) & (\text{V.109}) \\ & = \sum_{P,P'} (-1)^{PP'} \frac{d}{dp} \Big|_{\varepsilon_{n_{P'(1)}}^j} \left[\langle n_{P(1)}^i n_{P(2)}^i | I(p - \varepsilon_{n_{P(1)}}^i) | n_{P'(1)}^j n_{P'(2)}^j \rangle \right. \\ & \qquad \qquad \qquad \left. \times \langle n_{P'(1)}^j | \Sigma(p) | n_{P'(1)}^j \rangle \right], \end{aligned}$$

que l'on obtient en reconnaissant une dérivée de fonction delta de Dirac grâce à (V.98) (l'expression symétrique, avec la self énergie subie par l'un des électrons sortants, se déduit immédiatement de cette formule).

SECTION 6 (Chapitre V)

Conclusion

V/6.1

Ensemble des résultats

J'ai obtenu dans ce chapitre la contribution de la self énergie écrantée (V.1) au hamiltonien effectif au second ordre $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c). Le calcul de cette contribution a demandé de réaliser les intégrations de contour (V.17) — pour les diagrammes à deux photons (V.1) — et (V.19) — pour les diagrammes à un photon (V.3). J'ai d'abord obtenu graphiquement les valeurs de ces intégrales (*cf.* section V/5), sous une forme où j'ai retiré des compensations numériques entre termes — le tout grâce à la méthode de la particule fantôme introduite dans la section IV/3. La contribution (V.17)+(V.19) de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ s'obtient grâce aux formule finales (V.104) (vertex), (V.107) (contribution irréductible) et (V.109) — qui rassemble les contributions (V.102) (diagrammes à un photon) et (V.108) (contribution réductible). Ces résultats finals¹ ont été publiés pour

¹Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, la renormalisation des self énergies écrantées (V.1a) demande de connaître de plus le « contre-terme de masse » associé à chacun des deux diagrammes de (V.1a) (voir par exemple MOHR *et al.* [1998, § 5] ou MOHR [1985]) : les divergences de la self énergie de chaque diagramme sont compensées

la première fois dans LE BIGOT *et al.* [2001b]¹.

La démarche que j’ai suivie dans ce chapitre est suffisamment générale² pour être appliquée au calcul de la contribution de *n’importe quel* diagramme de Feynman au hamiltonien effectif (III.39a). Elle illustre en particulier la méthode de la particule fantôme du chapitre IV, qui permet de façon systématique de mener des calculs graphiques, de les simplifier pour éviter des compensations numériques dans les formules obtenues — *cf.* section V/4 —, et enfin d’aboutir à des expressions formelles où il est possible de fixer de nombreuses énergies virtuelles grâce à de simples calculs sur des fractions rationnelles — *cf.* section V/5.

Nous avons vu dans la section V/2.2-e que l’évaluation du déplacement d’un niveau *isolé* est rendu (grâce à de nombreuses simplifications) beaucoup plus facile que l’évaluation d’un hamiltonien effectif. Nous aurions eu, pour traiter ce cas — le seul que peut traiter la méthode classique de Gell-Mann–Low–Sucher —, beaucoup moins de calculs à accomplir. Malgré tout, les principes généraux que nous avons tenté de faire apparaître permettent un calcul du hamiltonien effectif qui est systématique et simple dans son principe.

V/6.2

Perspectives

.....
 Calculs simplifiés

J’ai donné dans la section V/3 les résultats *exacts* des intégrations de contour³ (V.18) et (V.20) entre des états $|n_0^i\rangle$ et $|n_0^j\rangle$ non dégénérés. Dans la section V/4, j’ai obtenu ces mêmes intégrations, mais pour des états quelconques ; cependant, les résultats de la section V/4 ne contiennent que la *contribution dominante* aux intégrales (V.18) et (V.20), puisque j’ai négligé une quantité en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})]$ dans tous les résultats. L’avantage de cette démarche — en dehors du fait qu’elle a permis d’illustrer concrètement

par un diagramme où la self énergie est remplacée par un facteur proportionnel à un déplacement en énergie δmc^2 (*cf.* (VI.2) et la table III.2 (p. 109) des règles de Feynman). Les contre-termes à soustraire du hamiltonien effectif s’obtiennent mathématiquement en effectuant le remplacement $\langle a|\Sigma(p)|b\rangle \rightarrow \delta mc^2 \int d^3\mathbf{x} \phi_a^\dagger(\mathbf{x})\beta\phi_b(\mathbf{x})$ dans les éléments de matrice finals (V.104), (V.107) et (V.109). (Ceci s’obtient directement à partir des règles de Feynman du chapitre III et en remarquant que les propriétés analytiques d’un diagramme ne sont pas modifiées par le remplacement d’une self énergie par un contre-terme de masse $\rightarrow \times$.)

¹Les résultats de LE BIGOT *et al.* [2001b] généralisent ceux de INDELICATO and MOHR [2001] et de PERSSON *et al.* [1996] à des états quasi-dégénérés.

²Si l’on souhaite obtenir des expressions explicites pour les quantités en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{n^i}^{(0)} - E_{n^j}^{(0)})]$ apparues à plusieurs endroits, il suffit d’effectuer des calculs simples sur des *fractions rationnelles*, comme nous l’avons fait par exemple dans la section V/5 pour fixer certaines énergies virtuelles.

³Rappelons que ces intégrales, une fois connues, donnent immédiatement la contribution de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ — *cf.* section V/2.3.

et en détail les méthodes de la fonction de Green à deux temps et de la particule fantôme — est qu’il est possible d’obtenir les éléments de matrice dans le cas général sous la forme d’une contribution dominante (que j’ai obtenue) et d’une correction (que l’on peut toujours écrire explicitement car tous les calculs que j’ai menés ici ne font intervenir que des fractions rationnelles).

Cependant, si l’on cherche dans un premier temps $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) *seulement à des termes en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$ près*, alors il est possible d’y parvenir beaucoup plus rapidement qu’en suivant la démarche que nous avons employée ici. En effet, il suffit de chercher pour des états *dégénérés*¹ ($E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} = E_{\mathbf{n}^j}^{(0)}$) les intégrales $\mathcal{I}_{ij}^{\mathcal{D}}[\dots]$ à calculer (où \mathcal{D} est un certain diagramme) et de considérer que les expressions obtenues sont valables à une quantité négligeable en $\mathcal{O}[\alpha^2(E_{\mathbf{n}^i}^{(0)} - E_{\mathbf{n}^j}^{(0)})]$ près — ce qui est *a priori* toujours possible pour les diagrammes où aucune règle de sélection ne s’applique sur les états $|\mathbf{n}_0^i\rangle$ et $|\mathbf{n}_0^j\rangle$ (voir les sections V/3.3 et V/4.3 sur la self énergie). Cette autre démarche, moins précise que celle que nous avons suivie dans ce chapitre (puisqu’elle ne permet pas d’obtenir explicitement les corrections aux contributions dominantes), possède de nombreux avantages calculatoires : les calculs se font en distinguant *deux* contours d’intégration (contre les trois contours différents Γ_0^i , Γ_0^j et $\Gamma_0^{\neq ij}$ que nous avons dû employer) et les résultats d’intégration sont plus simples dans le cas dégénéré (comme on peut le voir en comparant les résultats des sections V/3 et V/4).

Que la démarche suivie pour calculer le hamiltonien effectif soit celle que je viens d’esquisser ou celle que j’ai employée dans ce chapitre — qui sont toutes les deux fondées sur la méthode de la particule fantôme —, les calculs du déplacement en énergie de niveaux *isolés* sont beaucoup plus faciles qu’avec la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher (qui est compliquée [BLUNDELL *et al.* 1993] par l’emploi d’un paramètre adiabatique infinitésimal — *cf.* cette référence et en particulier ses équations (2.19) à (2.22), ainsi que la section II/2.1).

.....
Calculs
numériques

Les formules que nous avons obtenues pour la contribution de la self énergie écrantée à $H_{\text{eff}}^{(2)}$ (III.51c) peuvent servir de base à des calculs *numériques* de ce hamiltonien effectif pour les niveaux quasi-dégénérés de l’hélium et des ions héliumoïdes ($1s2p^3P_1$ et $1s2p^1P_1$). Les seuls résultats numériques obtenus sur la self énergie écrantée sont récents et concernent seulement les états *isolés* (*cf.* section V/1.1). De plus, très peu de résultats numériques ont été publiés sur l’influence de diagrammes à deux photons sur les déplacements en énergie d’états *excités* [INDELICATO and MOHR 2001 ; MOHR and SAPIRSTEIN 2000] ou *quasi-dégénérés* [LINDGREN *et al.* 2001 ; ARTEMYEV *et al.* 2000] des ions héliumoïdes.

¹Avec la méthode de la fonction de Green à deux temps, les calculs d’un hamiltonien effectif pour des états dégénérés est aussi simple que ceux d’un niveau isolé, puisque dans ces deux cas partagent la même structure analytique pour les éléments de matrice (perturbatifs) de la fonction de Green.

V/6. Conclusion

Obtenir des prédictions théoriques précises sur la structure fine de l'hélium et des ions héliumoïdes demande donc un effort de recherche, qui permettra à terme d'exploiter au mieux les expériences¹ extrêmement précises de mesure d'énergies de transition dans ces systèmes, aussi bien récentes qu'à venir.

¹Des références sur les progrès expérimentaux dans ce domaine se trouvent dans la section V/1.1.

CHAPITRE VI

Calculs de self énergie

Sommaire

VI/1	Introduction	222
VI/1.1	Contenu du chapitre	222
VI/1.2	Motivations	222
VI/2	Cadre théorique	224
VI/2.1	Équation de Dirac (II)	224
VI/2.2	Formule de principe	225
VI/2.3	Méthodes numériques utilisées	227
VI/2.4	Quantités calculées	228
VI/3	Résultats sur la self énergie	231
VI/3.1	Résultats numériques	231
VI/3.1-a	Principe des évaluations numériques	231
VI/3.1-b	Niveaux étudiés	232
VI/3.1-c	Déplacements numériques	233
VI/3.2	Résultats analytiques	238
VI/3.2-a	Description du problème	239
VI/3.2-b	Formules finales	240
VI/4	Calcul des coefficients angulaires	244
VI/4.1	Calcul analytique	244
VI/4.1-a	Principe et difficultés des dérivations	244
VI/4.1-b	Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$	244
VI/4.1-c	Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$	248
VI/4.2	Optimisation analytique des coefficients	252
VI/5	Conclusion	255

Introduction

Contenu du chapitre

Ce chapitre constitue le deuxième thème de notre travail de thèse, dont nous avons publié une partie des résultats dans LE BIGOT *et al.* [2001a]. Nous y présentons des résultats *analytiques* et *numériques* sur la contribution de la *self énergie* (I.2a) aux niveaux de « grand » moment cinétique (nombre quantique de moment cinétique $j \geq 5/2$) dans les ions hydrogénoïdes. Nos calculs analytiques de coefficients angulaires peuvent être utilisés pour des calculs du déplacement en énergie dû à la self énergie, depuis l'*hydrogène* jusqu'aux *ions très chargés*, avec un noyau décrit par un potentiel électrostatique à *symétrie sphérique* (représentant par exemple des électrons internes). Nous donnons comme application de nos calculs analytiques les valeurs numériques de la self énergie que nous avons calculées pour des niveaux de grand nombre quantique de moment cinétique $5/2 \leq j \leq 9/2$ et de nombre quantique principal $3 \leq n \leq 7$, pour des noyaux ponctuels de nombre de charge couvrant une large plage ($10 \leq Z \leq 110$).

Motivations

Comme mentionné p. 28, le processus de *self énergie* (I.2a) constitue souvent, dans les hydrogénoïdes (un *électron* autour du noyau), la *plus grande* correction de l'électrodynamique quantique aux énergies prédites par l'équation de Dirac (II.1).

.....
 Atomes et
 ions à grand
 nombre
 d'électrons

Il est utile de la calculer pour des états de « grand » moment cinétique, car les couches d ($j = 3/2$ ou $j = 5/2$) sont peuplées dans l'état fondamental des *atomes* de numéro atomique $Z > 20$ [HAKEN and WOLF 1993, p. 320]. Nous avons reproduit dans la table VI.1 la liste des éléments pour lesquels les niveaux dont nous avons étudié la self énergie (*cf. infra*) commencent à être peuplés. Une expérience de spectroscopie laser sur le fermium ($Z = 100$) est en cours d'exploitation à Mayence [SEWTZ 2001].

De plus, les électrons du *cœur* de l'atome subissent une *grande charge effective*, si bien qu'une connaissance de la self énergie des hydrogénoïdes très chargés est souhaitable.

Il est aussi utile de calculer le déplacement dû à la self énergie pour les électrons *externes* des ions très chargés. Par exemple, des mesures de transitions (optiques) impliquant des électrons sur des couches d ont été effectuées sur une série de titaniomoïdes (de configuration fondamentale $3d^4$

TAB. VI.1 – *Peuplement des couches en fonction de Z* . Nous avons indiqué, pour chaque niveau pour lequel nous avons calculé le déplacement de self énergie, le premier élément où il est peuplé [HAKEN and WOLF 1993, Chap. 19]. Le signe « - » indique qu’aucun atome ne possède dans son état fondamental un électron sur la couche indiquée. (Nos déplacements numériques de self énergie sont ceux d’un électron dans le potentiel coulombien d’un noyau, mais peuvent servir de base à des calculs de self énergie dans les atomes.)

Couche	Z	Élément	Couche	Z	Élément
			6s	55	Césium (Cs)
3d	21	Scandium (Sc)	6p	81	Thallium (Tl)
4d	39	Yttrium (Y)	6d	89	Actinium (Ac)
4f	58	Cérium (Ce)	6f	-	-
5d	57	Lanthane (La)	7s	87	Francium (Fr)
5f	91	Protactinium (Pa)	7p	-	-
5g	-	-	7d	-	-
			7f	-	-

[FELDMAN *et al.* 1990]) et la meilleure prédiction théorique des longueurs d’onde observées requiert l’usage de QED (voir WATANABE *et al.* [2001], UTTER *et al.* [2000] et les références qui y sont incluses).

Hydrogénoïdes

Des mesures de transitions impliquant des niveaux de nombre quantique de moment cinétique $j \geq 5/2$ ont aussi été effectuées dans les *hydrogénoïdes*, comme par exemple dans l’hydrogène et le deutérium pour $j = 5/2$ [DE BEAUVOIR *et al.* 1997 ; SCHWOB *et al.* 1999 ; WEITZ *et al.* 1995 ; BOURZEIX *et al.* 1996]. L’évaluation théorique du déplacement de Lamb du niveau $8d_{5/2}$ est nécessaire à l’exploitation des résultats expérimentaux de DE BEAUVOIR *et al.* [2000], où les derniers résultats *perturbatifs* en l’interaction électron-noyau sont utilisés [DE BEAUVOIR *et al.* 2000, p. 80]. Les formules que nous avons trouvées permettent en principe¹ d’obtenir une nouvelle évaluation de la self énergie de ces niveaux de grand moment cinétique, qui aurait l’avantage d’être non perturbative (en l’interaction électron-noyau) — les calculs perturbatifs font parfois apparaître des contributions plus grandes qu’attendu [PACHUCKI 2001].

¹J’ai entamé des calculs non perturbatifs de la self énergie dans l’hydrogène et les ions hydrogénoïdes peu chargé ($Z \leq 10$) grâce au code numérique de JENTSCHURA *et al.* [1999a, 2001] auquel j’ai incorporé les résultats analytiques présentés dans ce chapitre.

Cadre théorique

Équation de Dirac (II)

Comme la self énergie est une perturbation aux niveaux électroniques prédits par l'équation de Dirac (II.1), nous rappelons ici quelques points concernant les *nombres quantiques* traditionnellement attachés aux solutions de (II.1) dans le cas d'un potentiel à *symétrie sphérique* ; nous utilisons en effet ces nombres quantiques dans les résultats analytiques et numériques présentés ci-dessous. Il ne nous apparaît pas nécessaire, par contre, de donner plus de détails techniques sur les solutions de l'équation de Dirac, détails que l'on pourra par exemple trouver dans ROSE [1961] ou dans le récent résumé de MOHR *et al.* [1998, § 3].

Notation
des états
propres

L'obtention des solutions de l'équation de Dirac (II.1) est facilitée (pour un potentiel électrostatique V à symétrie sphérique) par l'introduction de *deux* composantes radiales (dites « petite » et « grande ») dans les bi-spinneurs de Dirac ϕ_n (à quatre composantes complexes) ; on peut alors classer les états propres par *moment cinétique total* (orbital et de spin, nombre quantique j) et par *moment cinétique orbital* de la grande composante¹ (nombre quantique l) — que l'on complète par la projection du moment cinétique total sur un axe conventionnel (nombre quantique m) et, pour les états liés qui nous intéressent ici, par un nombre quantique « principal » n .

Les niveaux sont contraints de la même façon que pour l'équation de Schrödinger : $0 \leq l < n$ avec $n \geq 1$. Le nombre quantique de moment cinétique total peut, par composition du moment cinétique orbital et de celui de spin, prendre quant à lui les deux valeurs $j = l \pm 1/2$. On note alors les états propres sous la forme nl_j : $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, *etc.*²

Nombre
quantique
de Dirac

Nous utiliserons par la suite le nombre quantique de Dirac, qui regroupe les nombres quantiques de moment cinétique (l et j) en *un seul* nombre κ « de Dirac » défini par

$$\kappa \equiv \begin{cases} l > 0 & \text{si } j = l - 1/2, \\ -l - 1 < 0 & \text{si } j = l + 1/2, \end{cases} \quad (\text{VI.1})$$

¹Les termes de « petite » et « grande » composante se justifient par les *normes* respectives des deux *fonctions* radiales correspondantes pour les états propres dans un potentiel coulombien (l'amplitude de la petite composante peut *localement* dépasser celle de la grande composante, cependant).

²Cette notation d'états électroniques est cohérente avec la limite non relativiste de l'équation de Dirac : le niveau nl_j se transforme à la limite non relativiste ($Z \rightarrow 0$) en le niveau nl de l'équation de Schrödinger.

où le *signe* de κ indique lequel des deux couplages $j = l \pm 1/2$ a été effectué dans la grande composante de l'état propre de Dirac. On obtient ainsi les correspondances suivantes entre les nombres quantiques :

$$\begin{aligned} s_{1/2} &\leftrightarrow \kappa = -1 \\ p_{1/2} &\leftrightarrow \kappa = +1 \\ p_{3/2} &\leftrightarrow \kappa = -2 \\ d_{3/2} &\leftrightarrow \kappa = +2 \\ &\dots \end{aligned}$$

Notons que l'on peut d'après (VI.1) retrouver aisément les nombres quantiques j et l à partir de κ : $j = |\kappa| - 1/2$ et $l = |\kappa + 1/2| - 1/2$.

VI/2.2

Formule de principe

Le déplacement en énergie d'un électron — par rapport à l'énergie prédite par l'équation de Dirac (II.1) — dû à la self énergie (I.2a) est donné par [BARANGER *et al.* 1953 ; MOHR 1974b ; MOHR *et al.* 1998]

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{SE} = & \hspace{15em} \text{(VI.2)} \\ & \text{Re} \left\{ 2i\alpha \int dz d^3\mathbf{x}_2 d^3\mathbf{x}_1 \phi_n^\dagger(\mathbf{x}_2) \alpha^\mu G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; z) \alpha^\nu \phi_n(\mathbf{x}_1) H_{\mu\nu}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; \varepsilon_n - z) \right. \\ & \left. - \delta mc^2 \int d^3\mathbf{x} \phi_n^\dagger(\mathbf{x}) \beta \phi_n(\mathbf{x}) \right\}, \end{aligned}$$

où l'on reconnaît la structure du diagramme correspondant

$$\phi_n(\mathbf{x}_1) \xrightarrow{\varepsilon_n} \mathbf{x}_1 \xrightarrow{G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; z)} \mathbf{x}_2 \xrightarrow{\varepsilon_n} \phi_n^\dagger(\mathbf{x}_2) \quad \text{(VI.3)}$$

ainsi que l'énergie due à une masse $-\delta mc^2$, au premier ordre en perturbation (à des fins de renormalisation) — la matrice β provenant du terme d'énergie de masse dans le hamiltonien de Dirac (II.1). L'état n de Dirac est bien sûr celui pour lequel est calculée cette correction ; toutes les notations sont rappelées dans la légende de la table III.1 et les composantes μ et ν sont implicitement sommées sur les valeurs $0, \dots, 3$.

Le déplacement (VI.2) donne la contribution de la self énergie (VI.3) pour un électron dans un champ *statique* mais de *forme quelconque* (modélisé par des potentiels V et \mathbf{A} dans l'équation de Dirac (II.1)) — l'effet du champ du noyau apparaît au travers des états propres ϕ_n de (II.1) et de la fonction de

Green G (III.62). Pour un potentiel électromagnétique à symétrie sphérique, Le déplacement de self énergie (VI.2) ne dépend pas du nombre quantique magnétique m , par invariance par rotation.

.....
 Régularisation Le déplacement \mathcal{E}_{SE} donné par (VI.2) est *formel* car infini¹ : il doit être rendu fini par une procédure de *régularisation* [MOHR *et al.* 1998, p. 279]. Des exemples concrets de régularisation de la self énergie d'un électron lié peuvent être trouvés par exemple dans INDELICATO and MOHR [1992] et MOHR [1974b] (régularisation de Pauli-Villars) et dans [YEROKHIN and SHABAEV 1999] (régularisation dimensionnelle). Rappelons-en cependant brièvement le principe.

La self énergie — premier terme de (VI.2) — est d'abord modifiée en une quantité *finie* dépendant d'un *paramètre* Λ , choisie de façon à ce que l'on retrouve (formellement) le premier terme de (VI.2) pour $\Lambda \rightarrow \infty$. La divergence de ce terme pour $\Lambda \rightarrow \infty$ est alors *absorbée* en régularisant aussi le second terme par une paramétrisation de la contribution électromagnétique à la masse ($\delta m \rightarrow \delta m(\Lambda)$), choisie sous la *contrainte* suivante, venant de la théorie de la relativité : un électron *libre* — potentiel électromagnétique nul dans l'équation de Dirac (II.1) —, de quantité de mouvement \mathbf{p} , doit avoir une énergie E telle que $E^2 = \mathbf{p}^2 + m_e c^2$, où m_e est la masse *observée* de l'électron ; comme cette égalité est obtenue grâce à l'équation de Dirac (II.1), cette contrainte impose qu'un électron *libre* de masse m_e possède une énergie qui ne reçoit pas de contribution de la self énergie ($\mathcal{E}_{SE} = 0$), celle-ci étant déjà incluse dans son énergie de masse $m_e c^2$. Ce procédé fixe ainsi la fonction $\delta m(\Lambda)$ grâce à l'étude du cas limite d'un potentiel extérieur nul. La self énergie (VI.2) s'en déduit alors pour un potentiel quelconque en prenant la limite $\Lambda \rightarrow \infty$.

.....
 Renormalisation Plusieurs stratégies de renormalisation ont été développées pour gérer efficacement la soustraction numérique du contre-terme de masse dans la self énergie (VI.2). Nous mentionnons pour référence les travaux (souvent récents) suivants : pour la renormalisation dans l'*espace des coordonnées* (\mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2) [INDELICATO and MOHR 1992, 1998b, 2001], dans une décomposition en *ondes partielles* [PERSSON *et al.* 1993 ; QUINEY and GRANT 1994], et par une décomposition du propagateur (III.62) de l'électron lié en puissances du potentiel du noyau [SNYDERMAN 1991 ; BLUNDELL and SNYDERMAN 1991 ; BARANGER *et al.* 1953 ; WICHMANN and KROLL 1956 ; YEROKHIN and SHABAEV 1999 ; INDELICATO and MOHR 2001, 1998b, 1992].

¹On peut localiser la source de la divergence aux domaine d'intégration où les points d'interaction sont très proches ($\mathbf{x}_2 \approx \mathbf{x}_1$) et où l'énergie du photon échangé est très grande ($z \rightarrow \pm\infty$) [INDELICATO and MOHR 1992] ; ceci est directement lié au fait que l'intégrale sur l'énergie virtuelle z n'est pas exponentiellement décroissante si $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1$, comme on peut le voir dans le propagateur photonique (III.65).

Méthodes Comme mentionné p. 32, plusieurs méthodes ont été développées pour calculer *numériquement* le déplacement (VI.2). Nos calculs analytiques s'appliquent à un ensemble de méthodes numériques qui sont les plus précises disponibles actuellement pour le calcul de la self énergie; elles ont été développées à partir de la méthode introduite par MOHR [1974b,a] à la suite de BROWN *et al.* [1959] et DESIDERIO and JOHNSON [1971], et améliorée récemment [INDELICATO and MOHR 1992, 1998b, 2001] de façon à ce que la procédure de renormalisation s'applique aussi à un potentiel nucléaire *non coulombien* — comme par exemple un potentiel incluant celui créé par d'*autres* électrons [INDELICATO and MOHR 2001], ou bien celui d'un noyau *non ponctuel*.

Noyaux faiblement chargés Aucune des implémentations numériques des méthodes que nous venons de citer n'a été appliquée à des *noyaux faiblement chargés* (nombre de charge $Z < 5$), essentiellement à cause du fait que la self énergie est un *effet résiduel* provenant de la compensation¹ (par renormalisation) entre les déplacements en énergie dûs au diagramme (VI.3) d'une part pour un électron *lié* au noyau (premier terme de (VI.2)) et d'autre part pour un électron *libre* (deuxième terme de (VI.2), d'après les remarques faites plus haut sur la régularisation [MOHR *et al.* 1998, p. 282]). Cependant, une autre amélioration récente de la méthode numérique initiale [MOHR 1974b,a] a été proposée récemment [JENTSCHURA *et al.* 1999a ; JENTSCHURA 1999 ; JENTSCHURA *et al.* 2001], qui a permis d'obtenir numériquement la contribution de la self énergie pour de *petites* valeurs du nombre de charge, *jusqu'à l'hydrogène* ($Z = 1$) — pour lequel des mesures extrêmement précises d'énergies de transition sont disponibles [BIRABEN *et al.* 2001]. La méthode proposée dans JENTSCHURA *et al.* [1999a], JENTSCHURA [1999] et JENTSCHURA *et al.* [2001] consiste à utiliser une méthode numérique d'*accélération de convergence* [JENTSCHURA *et al.* 1999b] de séries (tous les calculs informatiques de la self énergie (VI.2) effectuent d'une façon ou d'une autre la sommation (III.62) contenue dans le propagateur électronique G) : un telle méthode, applicable à des séries qui ont atteint un certain régime

¹La self énergie est formellement d'ordre $\alpha m_e c^2$, puisque son diagramme contient un photon (*cf.* section III/3.3), mais après renormalisation, le déplacement de self énergie est d'ordre $\alpha(Z\alpha)^4 m_e^2$ — *cf.* section VI/3.1-c. Ceci cause, pour $Z = 1$, la perte d'environ huit chiffres significatifs (facteur α^4) par compensation numérique de deux résultats d'ordre α .

VI/2. Cadre théorique

asymptotique, permet d'obtenir une bonne précision sur la valeur d'une série à partir d'une *partie* seulement de ses termes (ce qui économise le temps de calcul des termes non utilisés et compense la relative lenteur d'un calcul numérique du propagateur de Dirac G (III.62) dans un format numérique précis — en quadruple précision, en l'occurrence).

Grands
moments
cinétiques

Les calculs analytiques présentés dans ce chapitre s'appliquent à la méthode de MOHR [1974b,a] et à ses améliorations successives que nous venons de mentionner ; ces méthodes ne permettaient que le calcul du déplacement en énergie (VI.2) pour des niveau de petit nombre quantique de moment cinétique ($j = 1/2$ ou $j = 3/2$) [MOHR *et al.* 1998, pp. 290–291]. Ont été ainsi calculées successivement les self énergies des niveaux $1s_{1/2}$ [MOHR 1974b,a], $p_{1/2}$ et $p_{3/2}$ [MOHR 1982] puis $d_{3/2}$ [MOHR and KIM 1992 ; INDELICATO and MOHR 1998a].

VI/2.4

Quantités calculées

Énergies
basse et
haute

Ma contribution aux simplifications analytiques du déplacement (VI.2) ne concerne qu'une *partie* du déplacement dû à la self énergie (l'autre partie étant déjà connue sous une forme adaptée aux calculs numériques) : il s'agit de la partie dite de « basse énergie » [MOHR 1974b], qui apparaît de la façon suivante.

Dans la méthode de Mohr [MOHR *et al.* 1998 ; MOHR 1974b,a], le comportement *sinusoïdal* des propagateurs électronique G (III.62) et photonique H (III.65) pour les grandes énergies — très mauvais pour les intégrations numériques — est remplacé par un comportement *exponentiellement décroissant* grâce à un *changement de contour* [MOHR 1974b ; MOHR *et al.* 1998] qui fait prendre à l'énergie virtuelle z de (VI.2) des valeurs imaginaires pures. Nous montrons ce changement de contour dans la figure VI.1 dans le cas général du calcul de la self énergie d'un niveau *excité* (suivant le même principe, d'autres contours peuvent être employés, comme par exemple dans BROWN *et al.* [1959] et DESIDERIO and JOHNSON [1971]).

Il est habituel [MOHR *et al.* 1998] de séparer le nouveau contour d'intégration sur z en deux parties [MOHR 1974b] : l'une où l'énergie de l'électron virtuel est faible ($0 \leq z \leq \varepsilon_n$, contour C_L de la figure VI.1, avec « L » pour *low*) et l'autre où elle est grande ($0 \leq |z| \leq \infty$, contour C_H de la figure VI.1, avec « H » pour *high*). Il en résulte un découpage du déplacement \mathcal{E}_{SE} (VI.2) en deux contributions :

$$\mathcal{E}_{SE} = \mathcal{E}_L + \mathcal{E}_H$$

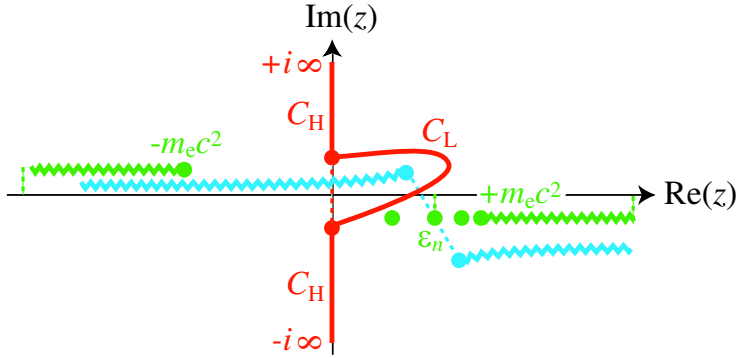


FIG. VI.1 – *Contour d'intégration pour la self énergie.* Afin d'améliorer les propriétés numériques de l'intégration sur l'énergie virtuelle z de l'électron, il est utile lui donner les valeurs parcourues par les contours C_L et C_H , obtenus par déformation du contour d'intégration initial ($z \in \mathbb{R}$). Les points représentent soit des pôles dûs aux états liés de Dirac (en vert), soit des points de branchement dûs aux photons de basse fréquence (en bleu). Les pointillés indiquent des quantités infiniment petites : distances des coupures électroniques (en vert) à l'axe réel, distance des points de branchement des coupures photoniques (en bleu) à l'énergie ε_n de l'état étudié, et extrémités du contour C_H près de $z = 0$.

avec une partie basse énergie, qui peut s'écrire [MOHR *et al.* 1998]

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_L \equiv & \frac{\alpha}{\pi} \varepsilon_n - \frac{\alpha}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\varepsilon_n} dz \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{x}_1 \phi_n^\dagger(\mathbf{x}_2) \alpha^l G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; z) \alpha^m \phi_n(\mathbf{x}_1) \\ & \times (\delta_{l,m} \nabla_2 \cdot \nabla_1 - \nabla_2^l \nabla_1^m) \frac{\sin[(\varepsilon_n - z) \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|]}{(\varepsilon_n - z)^2 \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|} \end{aligned} \quad (\text{VI.4})$$

(les composantes cartésiennes l et m sont sommées de 1 à 3 ; le \mathcal{P} indique la partie principale de Cauchy¹, qui implique que l'on a ramené les singularités de la fonction de Green G (III.62) sur l'axe réel) et une partie haute énergie

$$\mathcal{E}_H \equiv \text{self énergie (VI.2) avec } \int dz \rightarrow \int_{C_H} dz, \quad (\text{VI.5})$$

où le contour d'intégration est précisé dans la figure VI.1 (il va de $-i\infty$ à $-i0$ et de $+i0$ à $+i\infty$). Comme pour (VI.2), les notations peuvent être trouvées dans la légende de la table III.1.

¹Le passage du *contour* de basse énergie C_L de la figure VI.1 à la *partie principale* dans (VI.4) [MOHR 1974b, p. 35] est expliqué par exemple dans [MOHR *et al.* 1998, p. 288]. La partie principale permet d'obtenir la *partie réelle* de la formule (VI.2).

Coefficients
angulaires

Nos calculs angulaires s'appliquent au calcul de la self énergie pour un électron dans un potentiel électrostatique V à *symétrie sphérique* — V étant le potentiel de l'équation de Dirac (II.1). Des calculs angulaires généraux et une procédure de renormalisation numérique adaptée à ce cas ont déjà été publiés pour la partie de *haute énergie* (VI.5) [MOHR 1982 ; MOHR and KIM 1992 ; INDELICATO and MOHR 1992, 1998b]. Nous avons travaillé sur les coefficients angulaires de la partie de *basse énergie*, qui peut s'écrire après intégrations angulaires (avec κ_n le nombre quantique de Dirac de l'état ϕ_n étudié)

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_L = & \frac{\alpha}{\pi} \varepsilon_n - \frac{\alpha}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\varepsilon_n} dz \int_0^\infty dx_2 x_2^2 \int_0^\infty dx_1 x_1^2 \\ & \times \sum_{\kappa} \sum_{i,j=1}^2 f_{3-i}(x_2) G_{\kappa}^{ij}(x_2, x_1, z) f_{3-i}(x_1) A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}(x_2, x_1) \end{aligned} \quad (\text{VI.6})$$

et où les intégrations sur les directions des vecteurs \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 de l'expression (VI.4) sont remplacées par une somme (en ondes partielles) sur κ de

termes contenant les *coefficients angulaires* $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}(x_2, x_1)$ sur lesquels nous avons travaillé; nous utilisons ici les notations conventionnelles, qui sont détaillées dans MOHR [1974b]; MOHR *et al.* [1998] — notons en particulier que les fonctions f et A dépendent de plus de paramètres que ceux qui sont explicités dans (VI.6), comme nous le verrons par exemple dans la définition (VI.13) des coefficients angulaires. La partie de basse énergie sous sa forme (VI.6) ne fait plus apparaître que les deux *composantes radiales* (fonctions de la distance au noyau) $f_{1,2}(x)$ pour l'état propre ϕ_n étudié (voir la section VI/2.1) et $G_{\kappa}^{ij}(x_2, x_1, z)$ pour la fonction de Green G (III.62). Il n'est pas nécessaire ici de donner plus de détails sur ces fonctions radiales, que nous n'utiliserons pas dans nos calculs analytiques des coefficients $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$, mais nous mentionnons pour référence que des expressions en sont connues pour un électron dans un champ coulombien (MOHR [1974b]; MOHR *et al.* [1998, § 3.2]) et que des méthodes numériques ont été développées pour les potentiels électrostatiques sphériques (voir [MOHR *et al.* 1998, § 3] et les références qui y sont incluses).

.....

Plan Je calcule analytiquement dans la section VI/4.1 les coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$. Dans la section VI/4.2, j'*optimise* les formules obtenues en vue d'applications numériques, de façon à éviter l'apparition de compensations lors de l'évaluation sur ordinateur des coefficients $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$.

Mais avant l'exposition de ces résultats techniques (section VI/4), je présente (section VI/3.1) les déplacements \mathcal{E}_{SE} (VI.2) que j'ai calculés numériquement et je résume les principaux résultats analytiques (section VI/3.2).

SECTION 3 (Chapitre VI)

Résultats sur la self énergie

VI/3.1

Résultats numériques

VI/3.1-a \diamond **Principe des évaluations numériques**

L'évaluation numérique de la self énergie (VI.2) repose essentiellement sur un calcul par ordinateur des intégrations et de la somme contenues dans la formule (VI.6) (pour la contribution des photons de basse énergie) ou dans son analogue pour la partie haute énergie — ces calculs numériques apparaissent sous une forme ou une autre dans *toutes* les méthodes développées pour évaluer la self énergie.

Le code que j'ai utilisé a été écrit en majeure partie par Peter Mohr [MOHR 1974a] et par Paul Indelicato [INDELICATO and MOHR 1998b]. En particulier, j'ai bénéficié des techniques récemment développées pour mener

des calculs numériques précis de renormalisation [INDELICATO and MOHR 1992, 1998b, 2001]. J'ai dû adapter le code existant aux états de « grand » moment cinétique ($j > 3/2$) et y inclure les formules analytiques (VI.20) et (VI.23) que j'ai obtenues pour les coefficients angulaires. Il m'a aussi fallu développer des programmes pour traiter automatiquement les milliers de fichiers de résultats numériques produits par les programmes Fortran (j'ai étudié environ 500 états différents (n, κ, Z), dont la self énergie est composée de cinq parties numériques — cf. section D/3 — à rassembler) et produire des tables et des courbes de valeurs.

VI/3.1-b \diamond Niveaux étudiés

La plupart des niveaux que nous avons étudiés sont occupés par des électrons des atomes de la classification périodique (cf. table VI.1, p. 223) — bien que les déplacements en énergie présentés ici soient ceux de l'électron d'un ion hydrogénoïde, il est possible d'incorporer dans les études de niveaux atomiques ces résultats de QED obtenus dans des systèmes plus simples (voir par exemple LABZOWSKY *et al.* [1999] et les références citées dans LE BIGOT *et al.* [2001a]). Il s'agit des 21 niveaux $3d_{5/2}$, $4d_{5/2}$, $4f_{5/2}$, $4f_{7/2}$, $5d_{5/2}$, $5f_{5/2}$, $5f_{7/2}$, $5g_{7/2}$, $5g_{9/2}$, $6s_{1/2}$, $6p_{1/2}$, $6p_{3/2}$, $6d_{3/2}$, $6d_{5/2}$, $6f_{5/2}$, $7s_{1/2}$, $7p_{1/2}$, $7p_{3/2}$, $7d_{3/2}$, $7d_{5/2}$ et $7f_{5/2}$, dont j'ai calculé le déplacement dû à la self énergie (VI.2) pour 22 noyaux (considérés ponctuels, cf. section I/4.4-f) de nombre de charge Z différents compris entre 10 et 110 — les méthodes numériques développées pour les noyaux très chargés ont toutes des difficultés pour les faibles Z , à l'exception de la méthode développée par JENTSCHURA *et al.* [2001], à laquelle mes résultats analytiques de la section VI/3.2 peuvent aussi être appliqués.

Les seules valeurs numériques¹ de la self énergie pour ces niveaux ont à notre connaissance été obtenus par YEROKHIN and SHABAEV [1999], mais seulement pour des noyaux de $Z = 74$ (tungstène), 83 (bismuth) et 92 (uranium). Les résultats de YEROKHIN and SHABAEV [1999] sont moins précis que ceux présentés ici, de deux ordres de grandeur. Il est utile de développer des méthodes numériques précises pour les calculs non perturbatifs (en l'interaction électron-noyau), car cela permet à terme d'étudier les niveaux d'énergie d'ions peu chargés, pour lesquels toutes les techniques numériques mises au point se dégradent (à l'exception, déjà mentionnée, de celle de JENTSCHURA *et al.* [2001]).

¹Une courbe donnant le déplacement du niveau $6s_{1/2}$ se trouve dans INDELICATO and MOHR [1998a] — qui contient aussi un graphe du déplacement de self énergie du niveau $8d_{3/2}$. D'autre part, une évaluation du déplacement dû à la self énergie pour un électron $6s_{1/2}$ de valence a été obtenu dans LABZOWSKY *et al.* [1999].

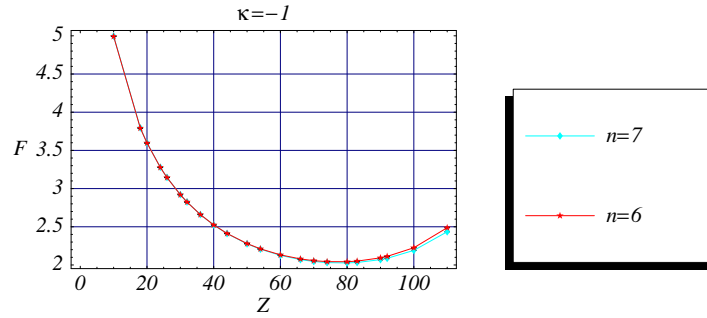


FIG. VI.2 – *Self énergie de niveaux $s_{1/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

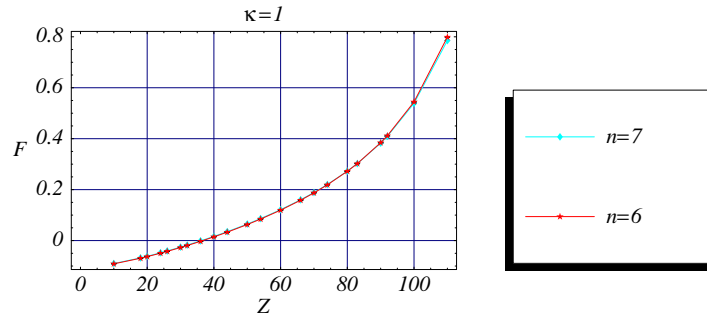


FIG. VI.3 – *Self énergie de niveaux $p_{1/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

VI/3.1-c ◇ Déplacements numériques

Fonction F Il est pratique de prendre en compte l'ordre de grandeur de la self énergie (VI.2) en fonction de la charge du noyau et du niveau atomique. On exprime ainsi habituellement la self énergie des ions hydrogénoïdes grâce à la fonction F définie par

$$\mathcal{E}_{\text{SE}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F(Z\alpha) m_e c^2. \quad (\text{VI.7})$$

Malgré ce que cette notation suggère, la « self énergie réduite » F dépend des nombres quantiques (n , l et j) de l'état électronique concerné.

Valeurs numériques L'ensemble de mes résultats pour la self énergie F se trouvent pour référence dans l'appendice D. Nous les avons représentés dans les figures

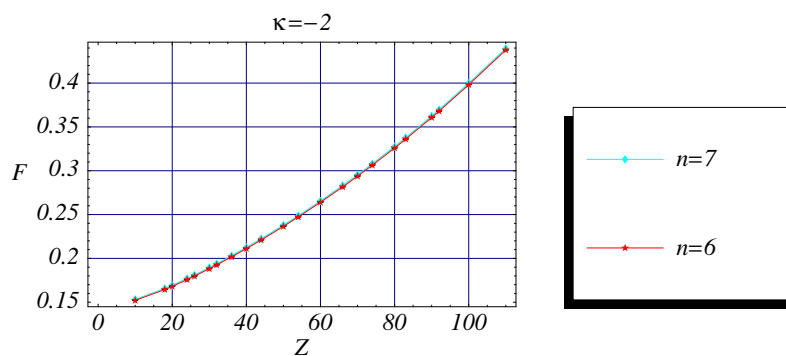


FIG. VI.4 – *Self énergie de niveaux $p_{3/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

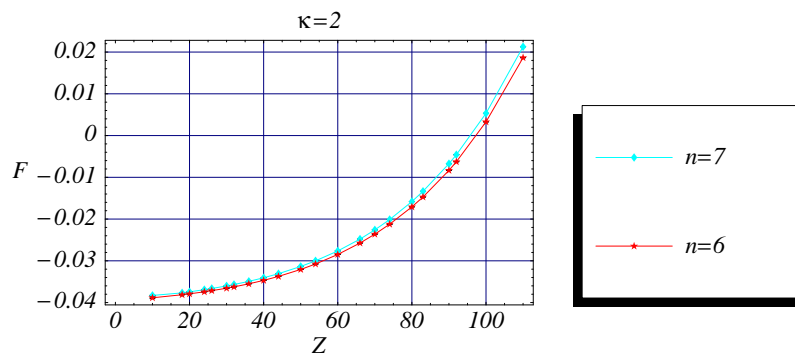


FIG. VI.5 – *Self énergie de niveaux $d_{3/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

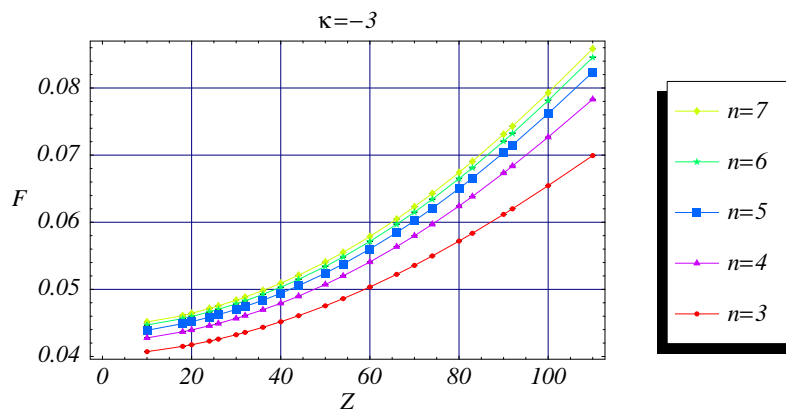


FIG. VI.6 – *Self énergie de niveaux $d_{5/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

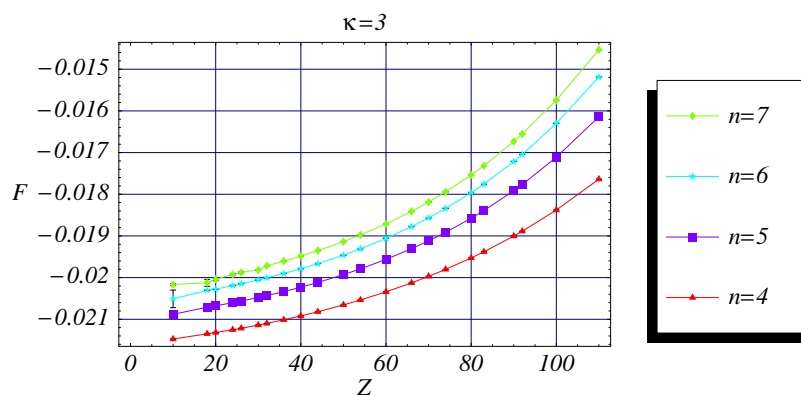


FIG. VI.7 – *Self énergie de niveaux $f_{5/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

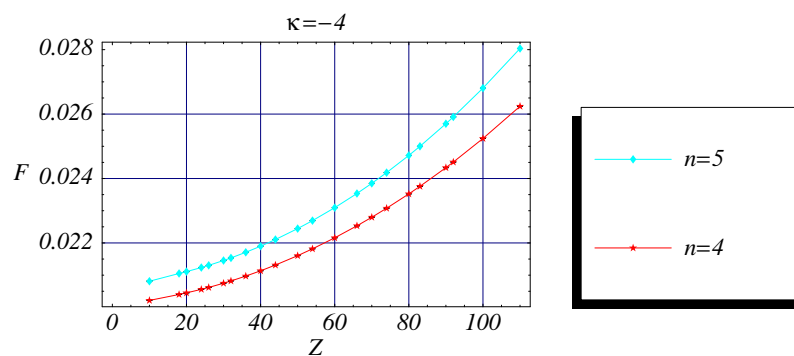


FIG. VI.8 – *Self énergie de niveaux $f_{7/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

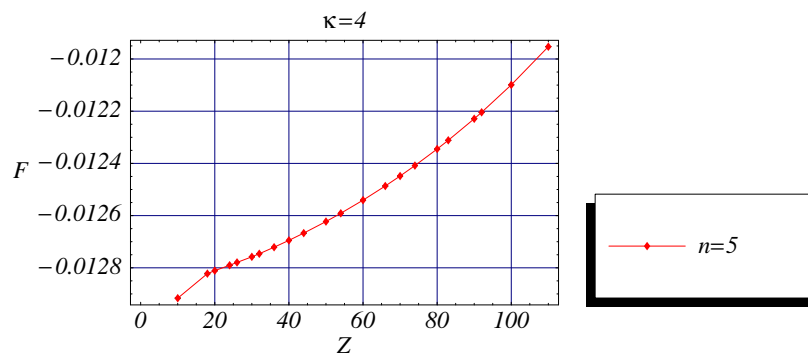


FIG. VI.9 – *Self énergie du niveau $5g_{7/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

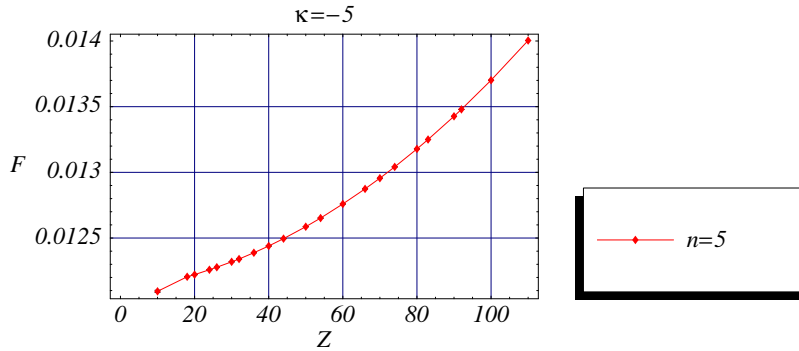


FIG. VI.10 – *Self énergie du niveau $5g_{9/2}$* . Le déplacement en énergie dû à la self énergie est exprimé par la fonction F définie dans (VI.7), pour plusieurs numéros atomiques Z .

VI.2–VI.10. Nous les avons regroupés par moments cinétiques (orbital et total), afin de montrer que le déplacement dû à la self énergie *dépend peu*¹ *du nombre quantique principal n* , lorsque celle-ci est exprimée à l'aide de la fonction F (VI.7). En d'autres termes, l'échelle en $1/n^3$ de la self énergie (VI.7) représente très bien la dépendance en n du déplacement (VI.2). Cette remarque permet donc d'estimer à partir de mes calculs le déplacement de self énergie de niveaux de nombre quantique principal plus élevé, mais possédant l'un des κ que j'ai étudiés.

Par contre, les déplacements obtenus pour un même nombre quantique principal n mais pour des moments cinétiques différents ne sont en général pas du même ordre de grandeur (comme par exemple pour $n = 6$ et $Z = 92$). Mes calculs montrent que la fonction F *décroit* lorsque le nombre quantique de Dirac κ (VI.1) augmente (en valeur absolue). Cependant, à notre connaissance, l'ordre de grandeur de la self énergie en fonction de κ est inconnu.

Validité des
résultats

Nous avons testé la validité des résultats de plusieurs manières. D'une part j'ai calculé par deux méthodes différentes la partie (VI.5) due aux photons de haute énergie (*cf.* appendice D). Les deux méthodes donnent des résultats compatibles pour les noyaux suffisamment chargés, si bien que nous considérons les résultats numériques de l'appendice D comme corrects pour $Z \geq 60$ [LE BIGOT *et al.* 2001a]. Nous donnons malgré tout les résultats numériques obtenus pour tous les noyaux que nous avons étudié, car ils donnent malgré tout des résultats vraisemblablement peu éloignés²

¹Ce comportement est aussi visible dans les self énergies numériques de MOHR and KIM [1992], qui sont données pour des électrons de « bas » moment cinétique ($j = 1/2$ et $j = 3/2$).

²Les valeurs obtenues pour les noyaux de nombre de charge $Z = 10$ sont très probablement incorrects, ainsi que ceux du niveau $n = 7$ pour $Z \leq 35$ — sûrement à cause des

des véritables valeurs (voir ci-dessous).

Nous avons d'autre part bénéficié des calculs perturbatifs préliminaires (non publiés) de self énergie qu'Ulrich Jentschura a effectués en parallèle avec mes évaluations numériques — ses résultats (à confirmer) sont listés dans la table D.1, p. 293. La self énergie s'exprime perturbativement autour de la limite non relativiste $Z = 0$ comme un développement en $Z\alpha$ et en $\ln [(Z\alpha)^{-2}]$ (ERICKSON and YENNIE [1965], cité dans MOHR and TAYLOR [2000, Eq. A13]) :

$$\begin{aligned} F(Z\alpha) = & A_{41} \ln [(Z\alpha)^{-2}] + A_{40} + A_{50} \times (Z\alpha) \\ & + A_{62} \times (Z\alpha)^2 \ln^2 [(Z\alpha)^{-2}] + A_{61} \times (Z\alpha)^2 \ln [(Z\alpha)^{-2}] \quad (\text{VI.8}) \\ & + A_{60} \times (Z\alpha)^2 + \dots \end{aligned}$$

où $(Z\alpha)^{-2}$ représente le rapport des échelles d'énergie de masse et d'énergies de liaison de l'électron [SAPIRSTEIN and YENNIE 1990]. Seul le coefficient A_{60} n'est pas encore publié pour les niveaux de grand moment cinétique ($j > 3/2$) que nous avons étudiés (ERICKSON and YENNIE [1965]; DRAKE and SWAINSON [1990]; MOHR and TAYLOR [2000, p. 468]), mais notre collaboration avec U. Jentschura devrait aboutir bientôt à des valeurs numériques sûres pour ce coefficient.

Ceci nous a permis d'une part de produire par une méthode indépendante des évaluations numériques des coefficients perturbatifs (par *fits* de mes résultats numériques, non présentés ici), qui ont guidé le calcul des coefficients A_{60} des niveaux de grand moment cinétique étudiés ici. D'autre part, grâce aux résultats obtenus pour A_{60} (voir la table D.1, p. 293), j'ai pu vérifier la cohérence des évaluations non perturbatives. J'ai représenté en parallèle les self énergies perturbatives et non perturbatives dans la section D/2. L'accord entre les deux méthodes est bon, ce qui confirme la pertinence des valeurs numériques listées dans l'appendice D — voir l'appendice D pour plus de précisions.

VI/3.2

Résultats analytiques

Je donne ici pour référence les principaux résultats *analytiques* obtenus au cours de mon travail¹ de calcul des coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$ de la partie basse énergie (VI.6). Comme certaines des formules qui m'ont conduit au but ont un intérêt plus général (elles concernent les polynômes de Legendre), j'indique aussi à toutes fins utiles les identités intéressantes que nous avons été amené à dériver ou utiliser.

oscillations importantes de la fonction d'onde, dans ce dernier cas.

¹Des formules différentes (non optimisées pour des applications numériques), obtenues par une autre méthode, peuvent être trouvées dans LE BIGOT *et al.* [2001a].

Afin d'obtenir des formules *générales*, nous prenons pour convention que $\sum_{i=a}^b \equiv 0$ si $b < a$.

VI/3.2-a \diamond Description du problème

Notations Les coefficients $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$ de la partie basse énergie (VI.6) sont définis à partir des polynômes de Legendre et de quelques fonctions simples [MOHR 1974b]. Nous avons ainsi besoin des fonctions suivantes :

$$P_n(\xi) \equiv \text{polynôme de Legendre de degré } n \quad (\text{VI.9})$$

(voir par exemple [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972]) ainsi que

$$\rho(x_1, x_2, \xi) \equiv \sqrt{x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\xi} \quad (\text{VI.10})$$

(qui vaut $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$ pour deux vecteurs \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 séparés d'un angle arccos ξ) et

$$T(\rho) \equiv \sin(b\rho)/(b^2\rho), \quad (\text{VI.11})$$

qui vient directement de la partie basse énergie sous la forme (VI.4) et où l'énergie du photon de la self énergie (VI.3) est notée [MOHR 1974b]

$$b \equiv \varepsilon_n - z. \quad (\text{VI.12})$$

Définition des coefficients angulaires Avec ces notations en main, nous pouvons donner les formules *les plus générales* des coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$ de (VI.6) dont nous disposons [MOHR 1974b] :

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{11} \equiv |\kappa| \int_{-1}^1 d\xi \left[P_{l_\kappa}(\xi) P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi) b^2 T(\rho) - \frac{1}{\kappa \kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_\kappa}(\xi) P'_{l_{\kappa_n-1}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T(\rho) \right] \quad (\text{VI.13a})$$

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{12} \equiv -|\kappa| \int_{-1}^1 d\xi \left\{ \left[P_{l_{\kappa-1}}(\xi) P_{l_{\kappa_n}}(\xi) - \frac{1}{\kappa \kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa-1}}(\xi) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \right] \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T(\rho) + [x_2 P_{l_{\kappa-1}}(\xi) - x_1 P_{l_\kappa}(\xi)] [x_2 P_{l_{\kappa_n}}(\xi) - x_1 P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi)] \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T(\rho) \right\} \quad (\text{VI.13b})$$

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{21} = A_{-\kappa, -\kappa_n}^{12}$$

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{22} = A_{-\kappa, -\kappa_n}^{11}$$

où nous avons introduit une notation pour le moment cinétique orbital de la grande composante d'un état de nombre quantique de Dirac κ (nous l'utiliserons abondamment) :

$$l_\kappa \equiv |\kappa + 1/2| - 1/2. \quad (\text{VI.14})$$

Calculs effectués Notre travail analytique a précisément consisté, dans un premier temps, à calculer les intégrales sur ξ contenues dans les coefficients angulaires (VI.13) (ξ est le cosinus de l'angle entre les positions \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 de \mathcal{E}_L (VI.4) [MOHR 1974b]); la variable ξ apparaît dans des polynômes (de Legendre), mais aussi dans la fonction T (VI.11) au travers de la distance ρ (VI.10) — et c'est là que réside la difficulté de l'intégration.

Des formules analytiques des coefficients (VI.13) pour des électrons de nombre quantique de Dirac tel que $|\kappa_n| = 1$ ou 2 ont été publiées dans MOHR [1974b] ($\kappa_n = -1$), MOHR [1982] ($\kappa_n = 1$ et -2) et MOHR and KIM [1992] ($\kappa_n = 2$). Les formules que j'ai obtenues pour ces nombres quantiques κ_n ne coïncident pas toujours avec celles publiées précédemment car j'ai optimisé¹ les formules pour des applications numériques (section VI/4.2).

VI/3.2-b \diamond Formules finales

Notations Les notations suivantes sont utiles à la présentation et à la dérivation de mes expressions finales pour les coefficients (VI.13).

D'abord des notations classiques :

$$j_l \equiv \text{fonction de Bessel sphérique de la première espèce} \quad (\text{VI.15})$$

(voir par exemple [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972]) et

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{VI.16})$$

pour les coefficients $3j$ de Wigner (voir par exemple [EDMONDS 1996]), élevés au carré (ce qui supprime toute question de signe dans sa définition) et avec les trois projections de moments cinétiques à zéro (ce qui rend leur évaluation numérique particulièrement aisée).

Puis des définitions *ad hoc* :

$$\mathcal{J}_l^2 \equiv l(l+1) \quad (\text{VI.17})$$

(carré du moment cinétique orbital correspondant au nombre quantique l),

$$y_1 \equiv b x_1 \text{ et } y_2 \equiv b x_2. \quad (\text{VI.18})$$

¹D'après mes tests, l'implémentation de P. J. Mohr des formules publiées (pour $|\kappa_n| = 1$ ou 2) est parfois à plusieurs centaines d'ordres de grandeur de la valeur exacte des coefficients (VI.13). Ces résultats erronés mais obtenus pour des valeurs particulières des paramètres d'intégration n'ont cependant apparemment qu'une influence négligeable sur les évaluations du déplacement dû à la self énergie pour les niveaux concernés (où $|\kappa_n| = 1$ ou 2), car ils ne contribuent que de façon négligeable aux intégrales calculées numériquement.

(distances au centre mises à l'échelle de la fonction T (VI.11)) et

$$\mathcal{L}(a, b, c) \equiv \begin{cases} \text{si } a + b + c \text{ impair :} \\ \sum_{\substack{i=|a-b| \\ i+|a-b| \text{ pair}}}^{c-1} \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 (2i+1)(\mathcal{J}_a^2 + \mathcal{J}_b^2 - \mathcal{J}_i^2) \\ \text{sinon : } 0 \end{cases} \quad (\text{VI.19})$$

qui vaut la quantité symétrique en a , b et c

$$\int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_a(\xi) P'_b(\xi) P'_c(\xi),$$

et est un des résultats que j'obtiens dans la section VI/4.1.

Formules
utiles

Avant la présentation de mes expressions finales pour les coefficients angulaires (VI.13), voici quelques formules sur les polynômes de Legendre, d'utilisation plus générale, que j'ai été amené à utiliser et à dériver. Leur intérêt réside dans une relative simplicité et dans le fait qu'elles sont plus difficiles à trouver dans la littérature que les autres identités que j'ai employées — nous ne les avons pas rencontrées dans ABRAMOVITZ and STEGUN [1972], EDMONDS [1996], BRINK and SATCHLER [1993] ni ailleurs, bien qu'elles figurent probablement dans quelque ouvrage.

Les formules que nous donnons ici sont dérivées dans la section dévolue aux calculs analytiques (VI/4.1). Il s'agit d'un développement simple (VI.34) sur la base des polynômes de Legendre :

$$(1 - \xi^2) P'_a(\xi) P'_b(\xi) = \sum_{i=|a-b|}^{a+b} \frac{2i+1}{2} (\mathcal{J}_a^2 + \mathcal{J}_b^2 - \mathcal{J}_i^2) \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_i(\xi),$$

d'une sorte d'intégration par parties (VI.45) valable pour toutes fonctions f et g (intégrables et dérivables) :

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_l(\xi) [g(\xi) f'(\xi)] \\ &= \int_{-1}^1 d\xi l(l+1) P_l(\xi) [g(\xi) f(\xi)] - \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_l(\xi) [g'(\xi) f(\xi)]. \end{aligned}$$

La dernière formule est relativement facile à obtenir, mais ce n'est pas le cas de la première (cf. section VI/4.1), comme nous allons le voir.

Coefficients
angulaires

Nous pouvons maintenant donner pour référence les formules que nous proposons pour les coefficients angulaires (VI.13) de la partie de basse énergie sous la forme (VI.6). Les dérivations qui y conduisent se trouvent dans la section VI/4.

Avec les notations (VI.15), (VI.16), (VI.18) et (VI.19), le coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$ peut s'écrire

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{11} = \sum_{l=|l_\kappa - l_{\kappa_n}|}^{l_\kappa + l_{\kappa_n}} (2l+1)|\kappa| \left[2b \begin{pmatrix} l_\kappa & l_{-\kappa_n} & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 j_l(y_1) j_l(y_2) + \frac{1}{\kappa \kappa_n} \mathcal{L}(l, l_\kappa, l_{-\kappa_n}) \frac{j_l(y_1)}{y_1} \frac{j_l(y_2)}{x_2} \right]. \quad (\text{VI.20a})$$

Le coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ peut quant à lui s'exprimer comme

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{12} = \sum_{\substack{l=|l_\kappa - l_{\kappa_n}| \\ l+l_\kappa+l_{\kappa_n} \text{ pair}}}^{l_\kappa + l_{\kappa_n}} \frac{j_l(y_1)}{y_1} \frac{j_l(y_2)}{x_2} \frac{|\kappa|}{\kappa \kappa_n} (2l+1) \times \left\{ \begin{pmatrix} l_{\kappa_n} & l_\kappa & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 [\mathcal{J}_{\kappa_n}^2 (\mathcal{J}_l^2 + \mathcal{J}_\kappa^2 - \mathcal{J}_{\kappa_n}^2) + \kappa^2 (\mathcal{J}_l^2 - \mathcal{J}_\kappa^2 + \mathcal{J}_{\kappa_n}^2)] - \mathcal{L}(l, l_{-\kappa}, l_{\kappa_n}) \right\} + |\kappa| (2l+1) \begin{pmatrix} l_{\kappa_n} & l_\kappa & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \times \left[j'_l(y_1) \frac{j_l(y_2)}{x_2} (\mathcal{J}_l^2 - \mathcal{J}_\kappa^2 + \mathcal{J}_{\kappa_n}^2) / \kappa_n + \frac{j_l(y_1)}{x_1} j'_l(y_2) (\mathcal{J}_l^2 + \mathcal{J}_\kappa^2 - \mathcal{J}_{\kappa_n}^2) / \kappa + j'_l(y_1) j'_l(y_2) \times 2b \right]. \quad (\text{VI.20b})$$

Les derniers coefficients, $A_{\kappa, \kappa_n}^{21}$ et $A_{\kappa, \kappa_n}^{22}$, se déduisent quant à eux immédiatement de (VI.13). Les formules (VI.20a) et (VI.20b) ne font intervenir que des quantités calculables numériquement avec grande précision (fonctions de Bessel sphériques de la première espèce j_l , ainsi que leurs dérivées premières, et coefficients $3j$ de Wigner).

Optimisation
numérique

J'ai étudié en détail le calcul *numérique* (en précision *finie*) des formules (VI.20a) et (VI.20b) pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$ et $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ (cf. section VI/4.2), dans le but d'obtenir des évaluations précises de la partie basse énergie (VI.6). Il ressort de nos expériences numériques que l'on peut calculer très précisément les coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$, à condition d'une part d'effectuer les sommations de (VI.20a) et (VI.20b) selon les l décroissants et d'autre part de calculer le terme

$$l = l_{\min} \equiv |l_\kappa - l_{\kappa_n}|. \quad (\text{VI.21})$$

de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ (VI.20b) de la façon suivante : en définissant quatre zones du plan (κ, κ_n) selon :

$$\begin{aligned}
 \text{zone 1 : } & \kappa\kappa_n < 0 \text{ et } \kappa(l_\kappa - l_{\kappa_n}) \leq 0 \\
 \text{zone 2 : } & \kappa\kappa_n < 0 \text{ et } \kappa(l_\kappa - l_{\kappa_n}) > 0 \\
 \text{zone 3 : } & \kappa\kappa_n > 0 \text{ et } \kappa(l_\kappa - l_{\kappa_n}) \leq 0 \\
 \text{zone 4 : } & \kappa\kappa_n > 0 \text{ et } \kappa(l_\kappa - l_{\kappa_n}) > 0,
 \end{aligned} \tag{VI.22}$$

le terme $l = l_{\min}$ de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ (VI.20b) doit être calculé, dans les applications numériques, avec une formule qui dépend de la zone dans laquelle se trouve le couple (κ, κ_n) concerné :

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{12}(l = l_{\min}) = \tag{VI.23}$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \bullet \text{ zone 1 :} \\
 2b|\kappa|(2l_{\min} + 1) \begin{pmatrix} l_{\kappa_n} & l_\kappa & l_{\min} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 j_{l_{\min}+1}(y_1)j_{l_{\min}+1}(y_2) \\
 \bullet \text{ zone 2 :} \\
 A_{\kappa, \kappa_n}^{12}(l = l_{\min}) \text{ comme dans l'Eq. (VI.20b)} \\
 \bullet \text{ zone 3 :} \\
 \begin{pmatrix} -|\kappa|(2l_{\min} + 1) \begin{pmatrix} l_{\kappa_n} & l_\kappa & l_{\min} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 j_{l_{\min}+1}(y_1) \\
 \times \left\{ [j_{l_{\min}}(y_2)/x_2](\mathcal{J}_{l_{\min}}^2 - \mathcal{J}_\kappa^2 + \mathcal{J}_{\kappa_n}^2)/\kappa_n + 2bj'_{l_{\min}}(y_2) \right\} \end{pmatrix} \\
 \bullet \text{ zone 4 :} \\
 \begin{pmatrix} -|\kappa|(2l_{\min} + 1) \begin{pmatrix} l_{\kappa_n} & l_\kappa & l_{\min} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 j_{l_{\min}+1}(y_2) \\
 \times \left\{ [j_{l_{\min}}(y_1)/x_1](\mathcal{J}_{l_{\min}}^2 + \mathcal{J}_\kappa^2 - \mathcal{J}_{\kappa_n}^2)/\kappa + 2bj'_{l_{\min}}(y_1) \right\} \end{pmatrix}
 \end{array} \right.$$

(on voit clairement que (VI.23) simplifie aussi (VI.20b) de façon *formelle* : les quatre termes de (VI.20b) contenant des produits de fonctions de Bessel sont regroupés analytiquement dans (VI.23) en un seul produit de fonctions de Bessel.)

J'ai obtenu les résultats numériques sur la self énergie présentés dans la section VI/3.1 en incluant les formules (VI.20a), (VI.20b) et (VI.23) dans les procédures Fortran développées entre autres par les auteurs des méthodes décrites dans MOHR [1974a], MOHR [1982], MOHR and KIM [1992], INDELICATO and MOHR [1992], INDELICATO and MOHR [1998b], INDELICATO and MOHR [2001], INDELICATO and MOHR [1995] et INDELICATO and MOHR [1991].

Calcul des coefficients angulaires

Calcul analytique

VI/4.1-a \diamond **Principe et difficultés des dérivations**

Série de
polynômes

Notre stratégie de calcul des coefficients angulaires (VI.13) consiste essentiellement à exprimer tous les intégrandes comme des *séries de polynômes* en ξ , de façon à rendre les intégrations faciles — ce qui revient à obtenir un développement de la fonction T (VI.11) et de ses dérivées en séries de polynômes. C'est ainsi que nous aboutirons aux formules (VI.20a) (pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$) et (VI.20b) (pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$). Plusieurs autres voies de calcul s'offrent, comme par exemple pour l'expression des dérivées par rapport à ρ dans (VI.13) (voir les formules (VI.25) et (VI.40)). Les choix j'ai dû effectuer pour arriver aux deux formules (VI.20a) et (VI.20b) ont été motivés par les calculs déjà réalisés pour le cas d'un électron s [MOHR 1973] — et sont justifiés par la relative simplicité des expressions finales (VI.20) et (VI.23).

Intégrations
simples

Une deuxième difficulté se niche dans la recherche d'une expression *simple* pour le résultat des intégrations de polynômes. Les polynômes de Legendre apparaissent naturellement dans le développement de la fonction T (VI.11) — comme, d'une manière générale, dans toute fonction de la distance ρ (VI.10), puisque les polynômes de Legendre P_l sont des cas particuliers d'harmoniques sphériques $Y_{n,l}(\theta, \phi)$ — cf. (VI.24) et (VI.29) ci-dessous. Nous avons ainsi cherché à utiliser le plus souvent possible des résultats sur les intégrales de polynômes de Legendre — comme par exemple (VI.27), (VI.35) et (VI.48).

Fonctions
simples

Notons une autre contrainte des calculs analytiques des coefficients (VI.13) : afin de calculer numériquement la self énergie (VI.2), nous avons besoin d'obtenir des expressions définies à partir de fonctions *aisément calculables par ordinateur* (en Fortran), avec de plus une grande précision. Les formules (VI.20) et (VI.23) ne contiennent que des coefficients $3j$ de Wigner de la forme simple (VI.16), des fonctions de Bessel (VI.15) et leurs dérivées *premières*, ce qui rend leur implémentation relativement aisée. Enfin, les formules obtenues ne doivent pas donner lieu à des problèmes de compensations numériques, ce à quoi je suis parvenu (cf. section VI/4.2).

VI/4.1-b \diamond **Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$**

Nous commençons par la dérivation du résultat final pour le coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$ (VI.20a).

Intégrande
polynômial

Comme indiqué ci-dessus, les intégrations de (VI.13a) sont rendues simples par développement en série de polynômes en ξ . Ceci se réalise simplement pour T (VI.11) [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972], grâce à des polynômes de Legendre (VI.9) et à des fonctions de Bessel (VI.15) :

$$T[\rho(x_1, x_2, \xi)] = \frac{1}{b} \sum_{l \geq 0} (2l + 1) P_l(\xi) j_l(y_1) j_l(y_2) \quad (\text{VI.24})$$

(rappelons que les distances mises à l'échelle y_1 et y_2 sont définies dans l'Eq. (VI.18)); la dépendance en ξ est contenues uniquement dans des polynômes de Legendre — ce qui est une propriété générale des fonctions de $\rho(x_1, x_2, \xi)$ (VI.10), par décomposition sur les harmoniques sphériques. Quant à la *dérivée* de T qui apparaît dans la formule initiale (VI.13a), nous pouvons toujours la remplacer par une dérivée par rapport à ξ grâce à

$$\left. \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} f(\rho) \right|_{\rho(x_1, x_2, \xi)} = \frac{-1}{x_1 x_2} \frac{\partial}{\partial \xi} f[\rho(x_1, x_2, \xi)] \quad (\text{VI.25})$$

(qui provient directement de la définition de ρ (VI.10)). Notons que ce choix¹ possède le mérite de nous donner au travers de (VI.24) une expression de $(1/\rho)dT/d\rho$ sous forme d'une *série de polynômes en ξ* qui facilitera les intégrations sur ξ contenues dans (VI.13a).

En utilisant (VI.24) et (VI.25) dans (VI.13a), on obtient ainsi

$$A_{\kappa, \kappa_n}^{11} = |\kappa| \sum_{l \geq 0} (2l + 1) j_l(y_1) j_l(y_2) \int_{-1}^1 d\xi \left[b P_{l_\kappa}(\xi) P_{l_{-\kappa_n}}(\xi) P_l(\xi) - \frac{1}{\kappa \kappa_n} \frac{-1}{x_1 x_2} (1 - \xi^2) P'_{l_\kappa}(\xi) P'_{l_{-\kappa_n}}(\xi) P'_l(\xi) \right], \quad (\text{VI.26})$$

où nous avons utilisé l'identité $l_{\kappa_n-1} = l_{-\kappa_n}$ sur les moments orbitaux (*cf.* (VI.14)). L'intégrande est maintenant sous forme d'un simple polynôme en ξ ; l'intégration ne pose donc plus de problème de principe, même si trouver une forme simple pour son résultat n'est pas immédiat.

L'intégrale du *premier* terme de (VI.26) se réalise simplement grâce à résultat bien connu [EDMONDS 1996] :

$$\int_{-1}^1 d\xi P_a(\xi) P_b(\xi) P_c(\xi) = 2 \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2, \quad (\text{VI.27})$$

où le coefficient $3j$ employé se calcule par des méthodes numériques éprouvées [THOMPSON 1994].

¹Nous aurions pu à la place exprimer $(1/\rho)dT/d\rho$ avec une dérivation par rapport à x_1 ou x_2 — *cf.* (VI.40) ci-après. Cependant, contrairement à (VI.25), un tel choix ne nous a pas permis d'aboutir à des expressions simples pour les coefficients que nous cherchons à évaluer (VI.13).

.....
 Identité remarquable

Le *second* terme de (VI.26) est plus difficile à obtenir sous une forme simple. Dans une application numérique, il serait possible, à ce stade, d'effectuer par ordinateur et de façon très précise l'intégration sur ξ , mais cela demanderait le calcul et la manipulation de polynômes de Legendre. Mais j'ai obtenu une identité pratique qui mène rapidement à la formule analytique finale (VI.20a) : il s'agit du développement de $(1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)$ sur les polynômes de Legendre (*cf.* Eq. (VI.34) ci-dessous).

Mon calcul du développement de $(1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)$ sur les polynômes de Legendre repose sur le lien que ces polynômes entretiennent avec les harmoniques sphériques. Nous pouvons montrer de la façon suivante que cette quantité $(1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)$ est en fait un produit de ces harmoniques.

D'une part les dérivées de polynômes de Legendre sont reliées aux fonctions de Legendre associées d'ordres -1 et 1 [MATHEWS and WALKER 1970 ; EDMONDS 1996] :

$$\sqrt{1 - \xi^2}P'_i(\xi) = P_i^1(\xi) = -\mathcal{J}_i^2 P_i^{-1}(\xi), \quad (\text{VI.28})$$

où nous notons $P_l^m(\xi)$ la fonction de Legendre associée de degré l et d'ordre m [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972]. D'autre part les fonctions associées de Legendre de degré et d'ordre donnés sont en relation directe avec les harmoniques sphériques [EDMONDS 1996] :

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad (\text{VI.29})$$

où nous avons suivi la convention d'EDMONDS [1996] sur la phase des harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Il résulte donc de (VI.28) et de (VI.29) que le polynôme $(1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)$ peut s'écrire comme annoncé en un produit d'harmoniques sphériques (en notant $\xi \equiv \cos\theta$, ξ étant pris entre -1 et 1 — *cf.* (VI.13))

$$\begin{aligned} & (1 - \cos^2\theta)P'_a(\cos\theta)P'_b(\cos\theta) \\ &= -\mathcal{J}_b^2 P_a^1(\cos\theta)P_b^{-1}(\cos\theta) \\ &= 4\pi \sqrt{\frac{\mathcal{J}_a^2 \mathcal{J}_b^2}{(2a+1)(2b+1)}} Y_{a,1}(\theta, \phi) Y_{b,-1}(\theta, \phi); \end{aligned} \quad (\text{VI.30})$$

le dernier member est *indépendant* de l'angle ϕ , en tant que produit de deux harmoniques de projection totale nulle sur l'axe des angles θ — on peut aussi le voir explicitement avec (VI.29).

Le couplage des harmoniques sphériques de (VI.30) conduit à une décomposition [EDMONDS 1996]

$$\begin{aligned}
 & Y_{a,1}(\theta, \phi) Y_{b,-1}(\theta, \phi) && \text{(VI.31)} \\
 & = \sum_{i \geq 0} \sqrt{\frac{(2a+1)(2b+1)(2i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} a & b & i \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_{i,0}(\theta, \phi)
 \end{aligned}$$

qui correspond à un développement de $(1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)$ sur la base des polynômes de Legendre — grâce à (VI.30), (VI.31) et (VI.29) :

$$\begin{aligned}
 & (1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi) && \text{(VI.32)} \\
 & = -\sqrt{\mathcal{J}_a^2 \mathcal{J}_b^2} \sum_{i \geq 0} (2i+1) \begin{pmatrix} a & b & i \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} P_i(\xi).
 \end{aligned}$$

L'identité (VI.32) peut être encore simplifiée, de façon à ne faire apparaître que des coefficients $3j$ de Wigner de la forme simple (VI.16) — ce qui rend les calculs numériques encore plus faciles à mettre en œuvre. En effet, le second coefficient $3j$ de (VI.32) est non nul seulement si $a + b + i$ est *pair* ; or, dans *ce* cas, les deux coefficients $3j$ de (VI.32) sont reliés par [BRINK and SATCHLER 1993]

$$\sqrt{\mathcal{J}_a^2 \mathcal{J}_b^2} \begin{pmatrix} a & b & i \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\mathcal{J}_i^2 - \mathcal{J}_a^2 - \mathcal{J}_b^2}{2}. \quad \text{(VI.33)}$$

Cette équation n'est pas vérifiée si $a + b + i$ est impair. Cependant, il est possible de l'utiliser dans (VI.32), avec pour résultat

$$\begin{aligned}
 & (1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi) \\
 & = \sum_{i=|a-b|}^{a+b} \frac{2i+1}{2} (\mathcal{J}_a^2 + \mathcal{J}_b^2 - \mathcal{J}_i^2) \begin{pmatrix} a & b & i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_i(\xi), \quad \text{(VI.34)}
 \end{aligned}$$

puisque les termes où $a + b + i$ est impair sont nuls (par sélection sur les coefficients $3j$), tout comme dans (VI.32). Cette décomposition simple sur la base des polynômes de Legendre nous sera utile plusieurs fois dans la suite.

Seconde intégration Intégrer le second terme de $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$ dans la formule (VI.26) se ramène donc grâce au développement (VI.34) à de simples produits scalaires de la forme

$$\int_{-1}^1 d\xi P_i(\xi) P'_c(\xi) = \begin{cases} 2 & \text{si } i + c \text{ est impair et } i < c \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad \text{(VI.35)}$$

Nous pouvons ainsi utiliser pour intégrer le second terme de (VI.26) la formule relativement simple que l'on peut déduire de (VI.34) et (VI.35) :

$$\int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_a(\xi) P'_b(\xi) P'_c(\xi) = \quad (\text{VI.36})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{si } a + b + c \text{ impair :} \\ \sum_{\substack{i = |a-b| \\ i + |a-b| \text{ pair}}}^{c-1} \binom{a \quad b \quad i}{0 \quad 0 \quad 0}^2 (2i + 1) (\mathcal{J}_a^2 + \mathcal{J}_b^2 - \mathcal{J}_i^2) \\ \text{sinon : } 0 \end{array} \right.$$

(Nous utilisons ici la convention $\sum_{i=a}^b \equiv 0$ si $b < a$.) Ce résultat est la raison de ma définition (VI.19) et donne directement avec (VI.26) et (VI.27) ma formule finale (VI.20a) pour le coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$. D'après tous les tests que j'ai réalisés, cette formule ne fait apparaître aucune compensation numérique importante entre ses termes, ce qui permet de l'utiliser directement dans un code numérique.

Notons que la quantité (VI.36) est *symétrique* sous les permutations de a , b et c , bien que la formule du second membre ne le soit pas ; en particulier, si l'un des degrés a , b ou c est petit, on a *a priori* intérêt à l'utiliser comme valeur supérieure de l'indice i de la sommation de (VI.36), puisque celle-ci contient alors peu de termes. Nous tirons profit de cette propriété dans la formule finale (VI.20a) en donnant à c la valeur du moment orbital $l_{-\kappa_n}$ de la petite composante de l'état concerné, car celui-ci est relativement faible dans nos calculs numériques de la partie basse énergie (VI.6) — où l_κ peut au contraire prendre des valeurs de l'ordre du millier afin d'atteindre une précision suffisante dans la sommation.

VI/4.1-c \diamond Calcul du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$

Obtenir une formule simple et numériquement efficace à partir de la formule (VI.13b) du coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ est plus difficile que pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$ (VI.13a) ; ceci est dû en particulier au fait qu'il est plus compliqué de combiner entre eux des termes impliquant des polynômes de Legendre *différents* (en particulier $P_{l_{\kappa_n}}(\xi)$ et $P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi)$). Une autre difficulté provient de la présence de dérivées *secondes* dans (VI.13b), qui peuvent se traduire par des dérivées secondes de polynôme de Legendre, pour lesquelles nous ne disposons que de peu de formules simples d'intégration.

Uniformisation des polynômes de Legendre Dans un premier temps, nous remplaçons donc les occurrences de $P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi)$ dans (VI.13b) par $P_{l_{\kappa_n}}(\xi)$. Ceci peut être réalisé en notant que $l_{\kappa_n-1} = l_{-\kappa_n}$ — d'après (VI.14) — puis en utilisant

$$P_{l_{-\kappa_n}}(\xi) = \frac{1}{\kappa_n} P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) + \xi P_{l_{\kappa_n}}(\xi) \quad (\text{VI.37})$$

(que l'on peut aisément déduire de EDMONDS [1996]). Le dernier facteur entre crochets de (VI.13b) peut donc s'écrire

$$\begin{aligned} & [x_2 P_{l_{\kappa_n}}(\xi) - x_1 P_{l_{-\kappa_n}}(\xi)] \\ &= \left[(x_2 - x_1 \xi) P_{l_{\kappa_n}}(\xi) - \frac{x_1}{\kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \right]. \end{aligned} \quad (\text{VI.38})$$

Le facteur $(x_2 - x_1 \xi)$ se prête peu à une intégration simple, si bien que nous le transformons en le combinant avec la dérivation $(1/\rho)d/d\rho$ du dernier terme de (VI.13b). Ceci peut être réalisé en remarquant d'après (VI.10) que

$$x_2 - x_1 \xi = \rho \frac{\partial \rho}{\partial x_2}, \quad (\text{VI.39})$$

si bien qu'avec $\partial/\partial x_2 = (\partial\rho/\partial x_2)d/d\rho$ on obtient

$$(x_2 - x_1 \xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} = \frac{\partial}{\partial x_2}. \quad (\text{VI.40})$$

En insérant ce résultat dans (VI.38), on pour la fin du dernier terme de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ (VI.13b) une forme qui s'avérera pratique :

$$\begin{aligned} & [x_2 P_{l_{\kappa_n}}(\xi) - x_1 P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi)] \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \\ &= P_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{x_1}{\kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}, \end{aligned} \quad (\text{VI.41})$$

expression qui tient son utilité de l'usage des polynômes $P_{l_{\kappa_n}}(\xi)$ et $(1 - \xi^2)P'_{l_{\kappa_n}}(\xi)$, qui nous permettront à terme d'utiliser les formules d'intégrations dont nous disposons — (VI.27), (VI.35) et (VI.36).

Pour résumer, nous obtenons ainsi grâce à (VI.41) et (VI.13b) une expression de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ dont nous avons fait disparaître $P_{l_{\kappa_n-1}}(\xi)$ au profit de $P_{l_{\kappa_n}}$ seulement et dont la forme de l'intégrande s'avérera pratique :

$$\begin{aligned} A_{\kappa, \kappa_n}^{12} &= -|\kappa| \int_{-1}^1 d\xi \left(\frac{\partial}{\partial x_2} \left\{ [x_2 P_{l_{\kappa-1}}(\xi) - x_1 P_{l_{\kappa}}(\xi)] P_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T(\rho) \right\} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\kappa \kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa-1}}(\xi) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T(\rho) \right. \\ &\quad \left. + [x_2 P_{l_{\kappa-1}}(\xi) - x_1 P_{l_{\kappa}}(\xi)] \frac{-x_1}{\kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^2 T(\rho) \right). \end{aligned} \quad (\text{VI.42})$$

(Noter la dérivation par rapport à x_2 , placée à l'extérieur des crochets ; elle s'obtient aisément.)

Nous pouvons de la même façon remplacer $P_{l_{\kappa-1}}(\xi)$ par $P_{l_{\kappa}}(\xi)$ et $P'_{l_{\kappa}}(\xi)$ afin de rapprocher les différents termes de (VI.42) : en utilisant à nouveau (VI.41) (avec κ au lieu de κ_n et en échangeant les rôles de x_1 et x_2) :

$$\begin{aligned}
 A_{\kappa, \kappa_n}^{12} = & \\
 & -|\kappa| \int_{-1}^1 d\xi \left(\frac{\partial}{\partial x_2} \left\{ P_{l_{\kappa_n}}(\xi) \left[x_2 \frac{1}{\kappa} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T - P_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial}{\partial x_1} T \right] \right\} \right. \\
 & \quad - \frac{1}{\kappa \kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa-1}}(\xi) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T \\
 & \quad + \frac{-x_1}{\kappa_n} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \left[x_2 \frac{1}{\kappa} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa}}(\xi) \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^2 T \right. \\
 & \quad \left. \left. - P_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} T \right] \right). \tag{VI.43}
 \end{aligned}$$

Dérivations

Il reste à obtenir une forme simple (polynômiale en ξ) pour les fonctions T (VI.11) contenues dans (VI.43) ainsi que pour leurs dérivées premières et secondes. Pour effectuer ces dérivées $d/d\rho$ dans (VI.43), il est *a priori* plus pratique d'utiliser (VI.25) que (VI.40) (qui introduirait des dénominateurs en ξ) ; nous utilisons donc (VI.25) partout dans (VI.43), ce qui conduit à

$$\begin{aligned}
 A_{\kappa, \kappa_n}^{12} = & \tag{VI.44} \\
 & -|\kappa| \int_{-1}^1 d\xi \left(\frac{\partial}{\partial x_2} \left\{ P_{l_{\kappa_n}}(\xi) \left[\frac{-1}{\kappa x_1} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} T - P_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial}{\partial x_1} T \right] \right\} \right. \\
 & \quad - \frac{1}{\kappa \kappa_n} \frac{-1}{x_1 x_2} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa-1}}(\xi) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} T \\
 & \quad \left. + \frac{1}{\kappa_n x_2} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa_n}}(\xi) \left[\frac{-1}{\kappa x_1} (1 - \xi^2) P'_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} T - P_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \xi} T \right] \right).
 \end{aligned}$$

Afin d'utiliser les formules d'intégration sur les polynômes de Legendre dont nous disposons déjà ((VI.27), (VI.35) et (VI.36)), il est utile de faire disparaître la dérivée *seconde* $\partial^2 T / \partial \xi^2$ qui figure dans (VI.44). Nous effectuons cette manipulation grâce à une intégration par partie pondérée par des polynômes de Legendre :

$$\begin{aligned}
 & \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_l(\xi) [g(\xi) f'(\xi)] \\
 & = \int_{-1}^1 d\xi l(l+1) P_l(\xi) [g(\xi) f(\xi)] - \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) P'_l(\xi) [g'(\xi) f(\xi)].
 \end{aligned}$$

cette formule simple s'obtient directement par une intégration par partie qui utilise l'équation différentielle des polynômes de Legendre [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972]

$$\frac{d}{d\xi} [(1 - \xi^2)P'_l(\xi)] = -l(l + 1)P_l(\xi). \quad (\text{VI.45})$$

Nous appliquons donc (VI.45) au terme contenant $\partial^2 T / \partial \xi^2$ dans (VI.44) — avec $l \equiv l_{\kappa_n}$, $f \equiv \partial T / \partial \xi$ et $g \equiv (1 - \xi^2)P'_{l_{\kappa}}(\xi)$ —, ce qui nous donne

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)P'_{l_{\kappa_n}}(\xi)(1 - \xi^2)P'_{l_{\kappa}}(\xi) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} T \\ &= \int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2) [\mathcal{J}_{\kappa_n}^2 P_{l_{\kappa_n}}(\xi)P'_{l_{\kappa}}(\xi) + \mathcal{J}_{\kappa}^2 P'_{l_{\kappa_n}}(\xi)P_{l_{\kappa}}(\xi)] \frac{\partial}{\partial \xi} T, \end{aligned} \quad (\text{VI.46})$$

où nous avons utilisé l'équation différentielle (VI.45) sur la fonction g ainsi que la simple identité algébrique $l_{\kappa}(l_{\kappa} + 1) = \kappa(\kappa + 1)$, *i. e.* $\mathcal{J}_{l_{\kappa}}^2 = \mathcal{J}_{\kappa}^2$, qui provient des définitions (VI.14) et (VI.17).

.....
Intégrations

Les intégrations sur ξ dans (VI.44) sont maintenant faciles ; en effet, il suffit d'appliquer à (VI.44) la formule (VI.46) (de conversion de la dérivée seconde) ainsi que la décomposition (VI.24) de T (VI.11) (en série de polynômes) pour ramener les calculs d'intégration aux formes suivantes :

$$\int_{-1}^1 d\xi P_a(\xi)P_b(\xi)P_c(\xi) \quad (\text{VI.47a})$$

$$\int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)P_c(\xi) \quad (\text{VI.47b})$$

$$\int_{-1}^1 d\xi (1 - \xi^2)P'_a(\xi)P'_b(\xi)P'_c(\xi) \quad (\text{VI.47c})$$

(où le polynôme $P_c(\xi)$ provient du développement (VI.24)). Toutes ces intégrales s'expriment simplement grâce à (VI.27), (VI.35) et (VI.34), auxquelles il faut adjoindre la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972] :

$$\int_{-1}^1 d\xi P_a(\xi)P_b(\xi) = \frac{2\delta_{a,b}}{2a + 1}. \quad (\text{VI.48})$$

La suite de calculs que nous venons de décrire donne directement la formule finale (VI.20b) pour le coefficient $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ (VI.13b).

Optimisation analytique des coefficients

Compensations numériques
 Contrairement à la formule finale (VI.20a) pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{11}$, l'expression de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ que je viens de dériver (VI.20b) donne parfois lieu à des *compensations numériques* entre ses différents termes à l fixé — où l est la variable de sommation utilisée dans la formule (VI.20b). De telles compensations sont néfastes à une évaluation numérique en précision finie des coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$, si bien qu'il est utile de les faire apparaître *analytiquement* dans (VI.20b), ce que j'ai réalisé de la façon suivante.

Il n'est pas *a priori* pas nécessaire de chercher des compensations entre termes de (VI.20b) de l différents : en effet, les fonctions de Bessel sphérique de la première espèce j_l décroissent très vite avec leur ordre l (à argument fixé) :

$$j_l(z) \simeq \frac{1}{2^{3/2} l} \left(\frac{ez}{2l} \right)^l, \tag{VI.49a}$$

pour $l \gtrsim ez/2$ [MOHR *et al.* 1998] ; les *dérivées premières* des j_l décroissent aussi très vite en fonction de l , d'après (VI.49a) :

$$j'_l(z) \simeq \frac{1}{2^{3/2} z} \left(\frac{ez}{2l} \right)^l. \tag{VI.49b}$$

Ainsi les termes de la somme sur l contenue dans la formule (VI.20b) de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ ont des ordres de grandeur décroissant très vite quand l croît — je l'ai observé dans tous mes calculs numériques des termes de (VI.20b), qui prennent en compte tous les facteurs numériques utilisées avec les fonctions de Bessel.

Compensations dans $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$
 J'ai remarqué des compensations numériques importantes entre les quatre termes¹ de l'un des termes l de (VI.20b) : celui de $l = |l_\kappa - l_{\kappa_n}|$ (VI.21) — où κ et κ_n sont les deux nombres quantiques de Dirac qui servent à définir le coefficient angulaire $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$. Comme d'après (VI.49) ce terme $l = l_{\min}$ donne *a priori*² la contribution *la plus grande* à (VI.20b), il est nécessaire de faire apparaître *analytiquement* ces compensations pour qu'elles ne donnent pas lieu à une importante perte de précision dans les calculs en précision finie.

J'ai donc cherché entre lesquels des quatre termes de la contribution $l = |l_\kappa - l_{\kappa_n}|$ apparaissaient les compensations. Il apparaît deux types de compensations : soit au sein de *chacune* de paires de termes 1–2 et 3–4, soit dans les paires 1–3 et 2–4 (aucune compensation numérique entre les termes 1 et 4, et lorsqu'une compensation partielle existe entre deux termes, les deux autres aussi sont presque opposés).

¹Il y a dans (VI.20b) *quatre* produits de fonctions de Bessel, multipliés par certains facteurs puis sommés.

²Les expériences numériques que j'ai effectuées n'ont jamais contredit ce comportement.

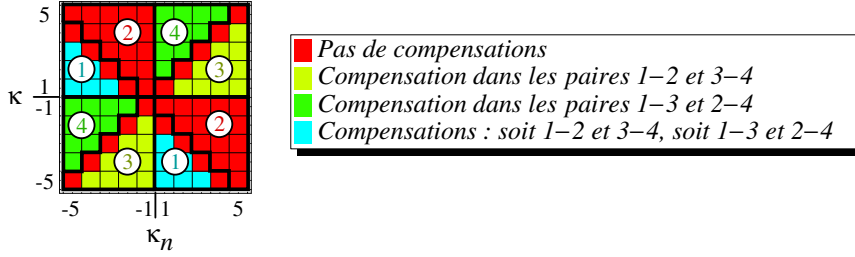


FIG. VI.11 – Nature des compensations observées numériquement entre les quatre termes de l'expression (VI.20b) de $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$ pour $l = |\kappa - \kappa_n|$. Le graphe indique les paires de termes presque opposés qui apparaissent dans le terme de (VI.20b) pour $l = |\kappa - \kappa_n|$; les compensations sont seulement de deux types (terme 1 avec terme 2 ou 3), indiqués ici. Parfois, deux compensations sont possibles. Nous avons représenté les quatre zones du plan (κ, κ_n) définies dans (VI.22) : elles délimitent (à leur frontière près) les différents types de compensations. En exprimant le terme $l = l_{\min}$ de (VI.20b) dans chacune des zones en fonction du signe de κ , on peut obtenir une expression (VI.23) de ce terme, qui contient le résultat analytique des compensations numériques.

De plus, une structure relativement *simple* émerge de l'étude des compensations en fonction des deux paramètres κ et κ_n : la figure VI.11 montre la nature de la compensation entre termes, quand elle existe ; comme indiqué sur cette figure, les compensations numériques peuvent parfois être réalisées selon l'un ou l'autre des schémas (quasi-annulation au sein des paires 1–2 et 3–4, ou bien au sein des paires 1–3 et 2–4). On remarque dans la figure VI.11 un découpage du plan (κ, κ_n) en plusieurs zones déterminées par le type de compensation numérique qui s'y produit. Comme indiqué dans la figure VI.11, ces zones sont définies mathématiquement (à leur frontières près) en fonction des paramètres κ et κ_n grâce aux formules (VI.22).

Afin d'étudier analytiquement les compensations numériques représentées dans la figure VI.11, j'ai calculé algébriquement les coefficients des fonctions de Bessel du terme $l = |\kappa - \kappa_n|$ de (VI.20b) : le découpage du plan (κ_n, κ) grâce aux quatre zones (VI.22), découpées elles-mêmes en deux suivant le signe de κ permet d'obtenir dans chacun des huit secteurs de ce plan une expression explicite simple¹ pour tous les coefficients de (VI.20b). Il apparaît alors dans le terme $l = |\kappa - \kappa_n|$ de (VI.20b) des combinaisons linéaires de fonctions de Bessel de la forme

$$\frac{l}{z} j_l(z) - j_l'(z). \quad (\text{VI.50})$$

Les compensations que j'ai trouvées numériquement proviennent analyti-

¹Il faut utiliser pour cela la définition $l_\kappa \equiv |\kappa + 1/2| - 1/2$ (VI.14) et calculer les coefficients $3j$ de Wigner [EDMONDS 1996 ; THOMPSON 1994 ; BRINK and SATCHLER 1993].

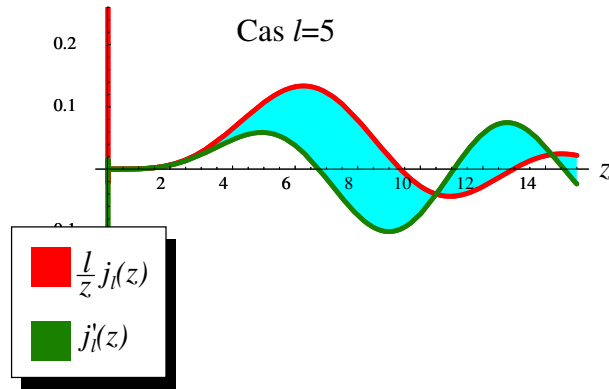


FIG. VI.12 – *Compensation entre fonctions de Bessel.* La quasi-égalité des fonctions de Bessel $\frac{l}{z}j_l(z)$ et $j'_l(z)$ de (VI.50) pour $z \lesssim l$ crée des compensations numériques dans la formule (VI.20b) du coefficient angulaire $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$. La différence des deux fonctions représentées ici s'exprime analytiquement (VI.51), ce qui permet d'obtenir pour (VI.20b) une formule *sans compensations numériques* (VI.23).

quement de (VI.50) : comme illustré dans le graphe de la figure VI.12, qui montre les deux termes de (VI.50) dans le cas $l = 5$,

$$\frac{l}{z}j_l(z) - j'_l(z) \simeq 0 \text{ pour } z \lesssim l.$$

J'ai explicité *analytiquement* cette compensation grâce à une identité classique sur les fonctions de Bessel sphériques de la première espèce [ABRAMOVITZ and STEGUN 1972] :

$$\frac{l}{z}j_l(z) - j'_l(z) = j_{l+1}(z). \quad (\text{VI.51})$$

C'est en reconnaissant la différence (VI.51) dans les expressions du terme $l = |l_\kappa - l_{\kappa_n}|$ de (VI.20b) — avec des coefficients évalués dans chaque zone (VI.22) individuellement — que j'ai obtenu la simplification (VI.23). Remplacer le terme $l = |l_\kappa - l_{\kappa_n}|$ de la formule (VI.20b) par (VI.23) dans les calculs numériques permet ainsi d'obtenir des valeurs *très précises* du coefficient angulaire $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$.

Conclusion

Résultats
analytiques

Grâce à mes résultats *analytiques* de la section VI/3.2, la méthode numérique la plus précise de calcul de la self énergie (VI.2) disponible actuellement peut être maintenant appliquée en principe à *n'importe quel* état électronique (*cf.* section VI/2.3) — alors qu'elle était auparavant restreinte aux états de faible moment cinétique ($j \leq 3/2$). En particulier, elle peut servir à calculer le déplacement de self énergie d'électrons présents dans les couches élevées des atomes (*cf.* section VI/1.2) — ce qu'il est parfois nécessaire de faire pour expliquer certains résultats expérimentaux (voir les références citées dans LE BIGOT *et al.* [2001a]).

Les formules (VI.20a), (VI.20b) et (VI.23) que j'ai obtenues pour les coefficients angulaires de la méthode de MOHR [1974b] sont optimisées pour des calculs numériques en précision finie : elles ne donnent lieu à aucune compensation importante entre termes (*cf.* section VI/4.2).

Résultats
numériques

Nous avons obtenu *numériquement* le déplacement dû à la self énergie pour de nombreux niveaux électroniques, généralement occupés par un ou plusieurs électrons des atomes de la classification périodique (voir l'introduction de ce chapitre, la section VI/3.1-c et l'appendice D). Le code numérique que j'ai employé a permis de donner pour la première fois la self énergie de nombreux états électroniques, avec une très bonne précision (obtenir des

résultats précis pour des électrons dans le champ de noyaux très chargés est important, car la précision de toutes les méthodes numériques de calcul de la self énergie se dégrade lorsque l'on approche de l'hydrogène).

.....
Coefficients
perturbatifs

Ces résultats peuvent servir à obtenir des estimations des coefficients perturbatifs de la self énergie — *cf.* (VI.8). Ils ont ainsi servi à tester des évaluations (non définitives) des coefficients perturbatifs du déplacement de self énergie — *cf.* appendice D —, qu'ils confirment globalement. Réciproquement, le bon accord entre les résultats non perturbatifs présentés ici et les développement perturbatifs confirme par une méthode indépendante la qualité des résultats numériques obtenus, à quelques exceptions près — voir l'appendice D et la section VI/3.1-c.

Obtenir des valeurs sûres des coefficients perturbatifs de la correction de self énergie (VI.8) permet en particulier de prédire ce déplacement pour les niveaux de l'hydrogène — pour lequel de nombreuses mesures de fréquences de transition existent (*cf.* section I/3.2-a) et ont des implications sur la mesure du rayon du proton. Cependant, du travail (en cours) reste à accomplir avant de pouvoir publier des résultats définitifs pour le coefficient perturbatif A_{60} (*cf.* appendice D).

.....
Perspectives

Mes calculs analytiques et numériques ont permis de tester et d'améliorer légèrement le code numérique utilisé (développé en majeure partie par Peter Mohr [MOHR 1974a ; MOHR and KIM 1992] et Paul Indelicato [INDELICATO and MOHR 1992, 1998b, 2001]), ainsi que de montrer sa capacité à produire des résultats précis pour de nombreux états et des numéros atomiques Z variés, ce qui permet d'envisager son utilisation pour des calculs de self énergie à deux boucles — pour lesquels aucun résultat numérique complet n'existe encore (*cf.* section I/4.4-b).

Enfin, mes résultats analytiques de la section VI/3.2 s'appliquent aussi à la méthode de calcul numérique de self énergie développée par JENTSCHURA *et al.* [2001] spécialement pour l'hydrogène et les ions hydrogénoïdes peu chargés. Ils devraient permettre d'obtenir des évaluations *non perturbatives* (en l'interaction électron-noyau) de la self énergie dans l'hydrogène (projet en cours), avec l'application déjà mentionnée à la mesure de la taille du proton¹.

¹Une autre voie d'approche pour la mesure de la taille du proton consiste à étudier expérimentalement et théoriquement l'hydrogène muonique [POHL *et al.* 2001 ; JUNGSMANN *et al.* 2001], comme mentionné dans la section I/3.2-a.

CHAPITRE VII

Conclusion

.....
Systèmes
simples

Nous avons tout d'abord donné, dans le chapitre I, un aperçu de l'important travail expérimental de mesures de précision des fréquences de transition dans les systèmes simples (en nous concentrant surtout sur les systèmes à un et deux électrons : l'hydrogène, les ions hydrogénoïdes, l'hélium et les ions héliumoïdes). Nous y avons aussi présenté les outils théoriques actuellement utilisés pour prédire et évaluer numériquement les niveaux d'énergie atomiques.

Les grandes précisions atteintes par les expériences et la théorie dans l'*hydrogène* et dans l'*hélium* fournissent des mesures de certaines constantes fondamentales¹ qui sont parmi les meilleures disponibles. Nous avons aussi vu que la physique atomique rejoint la physique nucléaire, puisque les niveaux d'énergie de l'hydrogène obtenus expérimentalement et théoriquement sont sensibles à la taille du proton, qu'il faudrait déterminer à nouveau² : deux valeurs expérimentales contradictoires existent actuellement pour la taille du proton.

Les *ions lourds très chargés* (hydrogénoïdes, héliumoïdes et lithiumoïdes, surtout), donnent quant à eux la possibilité de tester l'électrodynamique quantique (QED) dans des situations physiques où le champ électromagnétique est extrêmement intense. Les effets de QED y sont très visibles (comme par exemple dans le déplacement de Lamb du fondamental de l'uranium hydrogénoïde, qui vaut à peu près 470 eV, soit près de 30 fois l'énergie d'ionisation de l'hydrogène atomique). Les transitions dans les ions très chargés produisent en général des rayons X dont la fréquence est expérimentalement plus difficile à déterminer que celles du domaine optique. Des progrès dans ce domaine seraient particulièrement intéressants pour tester encore mieux QED en champ électromagnétique fort.

¹Notamment la constante de structure fine α et le Rydberg.

²Une expérience importante sur l'hydrogène muonique est en cours de préparation pour déterminer ce rayon — cf. section I/3.2-a.

Méthode de
la fonction
de Green à
deux temps

L'hélium et les ions héliumoïdes (de noyau peu ou moyennement chargé) possèdent des états quasi-dégénérés (2^1P_1 et 2^3P_1 — cf. section I/4.4) : pour obtenir leurs énergies par un calcul perturbatif, il est nécessaire d'étudier *simultanément* ces deux niveaux. Aucune méthode n'existait pour exprimer formellement ces niveaux d'énergie tels qu'ils sont prédits par QED, avant l'introduction relativement récente de la « méthode de la fonction de Green à deux temps » [SHABAEV 1990a]¹. Elle n'a été concrètement utilisée pour des niveaux quasi-dégénérés que très récemment [ARTEMYEV *et al.* 2000 ; LE BIGOT *et al.* 2001a]. Afin de présenter cette méthode, nous avons d'abord donné les bases de l'électrodynamique quantique des états liés (*bound-state QED*), dans le chapitre II.

Le chapitre suivant (III) est consacré à la méthode de la fonction de Green à deux temps telle qu'elle est publiée, mais à laquelle j'ai ajouté, dans un but de clarification, nombre de détails absents des articles qui l'utilisent. Je démontre que deux problèmes importants sont laissés ouverts par les présentations publiées, qui concernent le calcul du *hamiltonien effectif* (III.39a) de la méthode — dont les valeurs propres donnent les énergie atomiques. Le premier problème est le suivant : j'ai montré dans les sections III/4.2 et IV/2 que le hamiltonien effectif doit être défini par des intégrales de contour autour des énergies atomiques exactes, qui sont *inconnues* — puisque l'on cherche à les exprimer formellement. En admettant que ce problème soit résolu, une seconde difficulté apparaît : les intégrales de contour définissant le hamiltonien effectif — cf. (III.39) — demandent de connaître la fonction de Green sur une partie du plan complexe, alors que les règles de Feynman (section III/5) ne la donnent que pour des énergies *réelles*.

Je résous ces deux problèmes dans le chapitre IV et dans l'appendice B. J'y démontre la formule (IV.4), qui indique comment permuter intégration de contour et développement perturbatif d'une fonction possédant un nombre fini de pôles simples à l'intérieur des contours d'intégration. Appliquée à la fonction de Green (III.10), cette formule permet de ramener le calcul du hamiltonien effectif (III.39a) à des intégrations de contour autour des énergies atomiques *non perturbées* (sommées des énergies de Dirac de l'ensemble des électrons d'un état), qui sont elles connues — cf. section IV/2.3.

Dans la seconde partie du chapitre IV, je propose la méthode « de la particule fantôme » : elle permet d'effectuer les nouvelles intégrales de contour (IV.5) qui définissent *perturbativement* le hamiltonien effectif, et ce

¹Une seconde méthode existe depuis très récemment, qui peut prédire les niveaux d'énergie atomiques même quand ils sont quasi-dégénérés : la méthode de l'opérateur d'évolution covariant [LINDGREN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001].

de façon *systematique* et *graphique*.

Enfin, je conclue la présentation des méthodes de la fonction de Green et de la particule fantôme en calculant *explicitement* une contribution particulière au hamiltonien effectif (au second ordre) : celle de la self énergie écrantée (correction de l'interaction électromagnétique entre électrons par la self énergie). Au cours du calcul, je dégage des principes généraux qui permettent d'obtenir de façon systématique des expressions formelles du hamiltonien effectif, qui ont l'avantage d'être physiquement simples (avec de nombreuses énergies virtuelles fixées).

La méthode de la fonction de Green à deux temps rend très pratiques les calculs de déplacements dus à QED sur des niveaux *isolés* — qui sont plus simple qu'avec la méthode très utilisée de Gell-Mann–Low–Sucher (*cf.* section II/2.1). Grâce aux nouveaux résultats et techniques présentés dans les chapitres IV et V — et de l'appendice B —, elle rend systématique l'obtention d'un hamiltonien effectif (formel, mais relativement adapté à des applications numériques), même dans le cas où les niveaux étudiés sont dégénérés ou quasi-dégénérés. Il serait intéressant de rendre explicite le lien entre ces méthodes et la technique de l'opérateur d'évolution covariant développée récemment par Ingvar Lindgren [LINDGREN 2000 ; LINDGREN *et al.* 2001], ce dont les deux approches pourraient bénéficier.

.....
Calculs de
self énergie

Enfin, le chapitre VI et l'appendice D contiennent des évaluations numériques du déplacement de self énergie — la plus grande contribution de QED aux énergies électroniques — d'un grand nombre de niveaux atomiques et pour un large éventail de nombres de charge du noyau ($10 \leq Z \leq 110$). Ces résultats représentent pour la plupart la seule évaluation disponible de la self énergie pour le niveau concerné. J'ai obtenu ces valeurs *numériques* grâce à un code développé en majeure partie par Peter Mohr et Paul Indelicato — le plus précis actuellement —, et grâce à l'implémentation de mes résultats *analytiques* présentés dans les sections VI/3.2 et VI/4 (calcul de coefficients « angulaires » de la méthode de MOHR [1974b]). Ces nouveaux résultats permettent à la méthode numérique utilisée de calculer *a priori*¹ la self énergie de n'importe quel état atomique.

J'ai inclus mes nouvelles formules pour les coefficients angulaires dans un code numérique de calcul de la self énergie adapté tout spécialement à l'hydrogène et aux hydrogénoïdes peu chargés (*cf.* section VI/5), ce qui devrait permettre d'obtenir prochainement des évaluations *non perturbative* (en l'interaction électron-noyau) de la self énergie de nombre de niveaux de l'hydrogène, pour lesquels elle n'a encore jamais été calculée.

Les résultats numériques obtenus ici pour des nombres de charge $10 \leq Z \leq 110$ peuvent en particulier servir, après confirmation des valeurs de la

¹Des problèmes de convergence numérique peuvent par exemple apparaître lorsque l'on étudie des états dont la fonction d'onde oscille beaucoup, ou lorsque celle-ci est plus proche du noyau et donc de la singularité du champ électrique.

self énergie pour $Z < 60$, à valider les calculs en cours des coefficients *perturbatifs* de la self énergie (*cf.* appendice D) — et en retour être eux-mêmes confirmés grâce à cette approche perturbative indépendante. Ils peuvent aussi servir de base à des calculs de contribution de la self énergie dans les atomes (voir les références citées dans LE BIGOT *et al.* [2001a]).

.....
 Perspectives

Les calculs analytiques du hamiltonien effectif de la self énergie écrantée présentés dans le chapitre V demandent à être poursuivis analytiquement et numériquement. En effet, il est important d'obtenir une évaluation par QED de la structure fine de l'hélium (*cf.* section I/3.2-b), car des mesures expérimentales très précises [GEORGE *et al.* 2001] prédisent une valeur de la constante de structure fine α qui est en désaccord avec la valeur actuelle [MOHR and TAYLOR 2000], principalement déduite de la mesure du rapport gyromagnétique de l'électron (libre). Or, depuis l'expérience récente de mesure de ce rapport dans le muon [BROWN *et al.* 2001], dont le résultat est intrigant, se pose la question de l'influence sur cette grandeur de la supersymétrie. Il est donc important d'obtenir des prédictions non perturbatives (en l'interaction électron-noyau) de la structure fine de l'hélium, ou bien au moins de confirmer les développements perturbatifs obtenus dans ce domaine.

Enfin, calculer numériquement la self énergie à *deux* boucles (I.2b) dans l'hydrogène est un projet important, car la connaissance seulement partielle que l'on possède actuellement de cette contribution limite la précision de la mesure de la constante de Rydberg par les expériences réalisées dans l'hydrogène et le deutérium [MOHR and TAYLOR 2001]. Les calculs numériques réalisés au cours de ce travail de thèse montrent que les codes développés pour calculer la self énergie forment une base solide pour attaquer ce problème.

Enfin, d'un point de vue plus général et purement théorique, il pourrait être intéressant d'intégrer dans l'étude des niveaux atomiques l'approche de Shwinger de la théorie des champs (voir par exemple BOGOLIUBOV and SHIRKOV [1980]) — par opposition à l'approche par diagramme de Feynman —, récemment remise au goût du jour [BROUDER and FRABETTI 2001 ; ROCHEV 2000].

APPENDICE A

Dérivation des règles de Feynman

SECTION 1 (Appendice A)

Introduction

A/1.1

Motivations

Situation
des règles
publiées

Cet appendice contient ma dérivation des principales règles de Feynman des tables III.1 et III.2. La majeure partie des règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps a été publiée dans SHABAEV [1990a] et ensuite reprise [SHABAEV 1994], mais toutefois sous une forme incomplète, avec en particulier des notations et des conventions non définies. En dehors de ce mémoire, la description la plus précises de ces règles se trouve dans SHABAEV [2000] et SHABAEV [2002], où l'auteur a rajouté des règles pour le contre-terme de renormalisation — *cf.* note 1, p. 217 — et pour le potentiel extérieur Φ de \hat{H}_I^I (II.18a).

Toutefois, à notre connaissance, nulle part ces règles ne sont *dérivées* ; je donne donc ici les principes qui m'ont permis de produire celles des tables III.1 et III.2. D'autre part, dans les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps que nous citons dans ce mémoire, rien n'est mentionné à propos de la liste des diagrammes contribuant à la fonction de Green à un ordre donné ; ce point, que j'ai explicité dans la section III/5.2-c, se trouve lui aussi justifié par la dérivation qui suit.

Nous ne donnons cet appendice que pour référence, car il n'est pas nécessaire à l'*usage* de la méthode de la fonction de Green à deux temps — thème des chapitres III–V.

A/2. Dérivation de plusieurs règles

.....

But des règles Le but des règles de Feynman de la méthode de la fonction de Green à deux temps est de fournir un moyen direct d'obtention (perturbative) des éléments de matrice (III.33) de la fonction de Green (III.9) pour des énergies E réelles. Ainsi que nous l'avons vu dans la section III/2.2, il est en effet nécessaire de définir séparément la fonction de Green pour des énergies réelles (III.9) et pour des énergies complexes (III.10); le passage de (III.9) à (III.10) et son lien avec le calcul du hamiltonien effectif (III.39a) est discuté dans le chapitre IV.

A/1.2

Plan de l'appendice

.....

Principe des dérivations Comme nous l'avons vu dans la section III/3, le point de départ du calcul perturbatif de la fonction de Green (III.9) est un développement (III.25b) du propagateur (III.25a). Le théorème de Wick permet d'associer à chaque terme de (III.25b) plusieurs diagrammes (*cf.* section III/3.3 et Eq. (III.29)). Chaque diagramme correspond à une expression mathématique (nous allons en voir un exemple dans cet appendice).

La définition (III.9) de la fonction de Green impose de calculer une *transformée de Fourier* (énergie contre temps) de chacune de ces contributions mathématiques au propagateur (III.25a); il en résulte qu'il est pratique d'effectuer *aussi* une transformation de Fourier de chacun des propagateurs élémentaires (III.26) pour exprimer la fonction de Green (III.9), ce que nous faisons plus loin — *cf.* (A.5). Une fois ces manipulations effectuées, il ne nous restera plus qu'à projeter la fonction de Green sur des fonctions d'onde propres ϕ_n (afin d'obtenir la contribution d'un diagramme aux éléments de matrice (III.33) que l'on cherche, ce qui permet à terme de calculer le hamiltonien effectif (III.39a)).

SECTION 2 (Appendice A)

Dérivation de plusieurs règles

.....

Quantité calculée Afin de montrer les principes de la dérivation des règles de Feynman des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108), le plus simple est de prendre un exemple. Nous allons donc prouver que (III.68) — obtenu avec les règles données dans les tables — est effectivement la contribution du diagramme (III.59) à l'élément de matrice (III.33) pris entre les « fonctions d'onde » (*cf.* (III.35)) $|n_0\rangle$ et $|n'_0\rangle$ des états propres non perturbés $|n_0\rangle$ et $|n'_0\rangle$ de \hat{H}_0 (II.12) (*cf.* (III.34), avec $N = 2$).

A/2.1

Du diagramme au propagateur

Diagramme

Le diagramme (III.59) qui nous intéresse ici provient de termes de Wick de (III.25b) que l'on peut représenter par (cf. section III/3.3)

$$(A.1)$$

Nous avons indiqué sur ce diagramme les positions entre lesquels on étudie la propagation des électrons, *i. e.* les paramètres du propagateur (III.25a) $S_F^2(\xi_1, \xi_2, \Delta t; \xi_1', \xi_2', t' = 0)$; nous avons aussi pris en compte le fait que pour définir la fonction de Green (III.9), il suffit de s'intéresser au propagateur (III.25a) entre les temps $t' = 0$ et Δt , comme noté p. 70.

D'autre part, insistons sur l'importance de l'*ordre* des coordonnées ξ utilisées dans ce diagramme : elles représentent les coordonnées entre lesquelles s'effectue la propagation dans (III.25a); en particulier, les indices « 1 » et « 2 » ont leur importance. Un diagramme qui différerait de (A.1) par une permutation, disons, de ξ_1 et ξ_2 représenterait une contribution *différente*¹ au propagateur (III.25a) — autrement dit, on obtiendrait ainsi un *autre* terme de Wick du développement (III.25b), caractérisé par une permutation des électrons sortants par rapport au diagramme (A.1).

Combinatoire

Plusieurs termes de Wick du développement (III.25b) donnent le diagramme (A.1) : en effet, dans (III.25b), il existe exactement $4!$ façons équivalentes de relier par des propagateurs (III.26a) les électrons externes (champs $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\bar{\psi}}_I$ de (III.25b)) aux $k = 4$ points d'interaction (cf. (II.18b)). Ces $4!$ termes identiques du développement (III.25b) du propagateur compensent exactement le facteur $1/k!$ de (III.25b), si bien qu'il est pratique de considérer que le diagramme (A.1) représente l'ensemble de ces $4!$ termes de même valeur contenus dans (III.25b).

Grâce aux conventions (III.26a) pour dessiner chaque terme de Wick de (III.25b), il semble que tout diagramme *connecté*² (cf. section III/3.3)

¹Les contributions au propagateur (III.25a) qui ne diffèrent que par des permutations des électrons entrants ou sortants sont néanmoins liées formellement de façon simple; c'est pourquoi plusieurs diagrammes ne différant que par des permutations sur ces électrons externes donnent des contributions formellement proches aux éléments de matrice (III.54) de la fonction de Green (cf. section III/5.2-c).

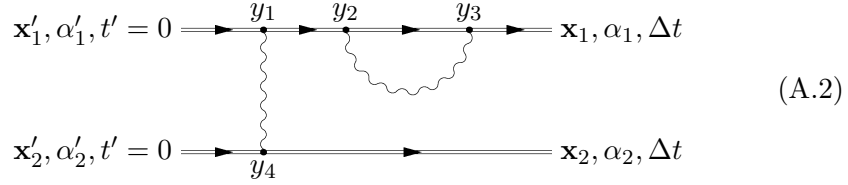
²Par exemple, un diagramme *déconnecté* comme le troisième diagramme de (III.29) ne correspond qu'à *un seul* appariement du terme à $k = 2$ interactions du développement (III.25b).

A/2. Dérivation de plusieurs règles

dont on a fixé l'étiquette des électrons externes — à la manière de (A.1) — donne exactement $k!$ termes identiques au développement (III.25b), où k est le nombre de points d'interaction. Nous ne possédons pas de preuve formelle de ce résultat ; il est cependant implicitement utilisé dans tous les articles sur la méthode de la fonction de Green à deux temps, puisque aucun « facteur de symétrie » (*cf.* PESKIN and SCHROEDER [1995, § 4.4]) n'apparaît dans les règles publiées [SHABAEV 1990a, 2000, 2002].

.....
 Expression
 du terme de
 Wick

Afin d'aider à la lecture de l'expression mathématique correspondant aux $4!$ termes de (III.25b) définis par le diagramme (A.1), nous indiquons les coordonnées spatiales et temporelles des points d'interaction :



Nous avons fait apparaître les coordonnées des quatre électrons externes (paramètres du propagateur (III.25a)) sous la forme $(\mathbf{x}, \alpha) = \xi$ (III.6), ainsi que les temps τ et les positions spatiales \mathbf{y} des interactions (*cf.* (III.25b) et (II.18b)), regroupés dans des 4-vecteurs $y \equiv (\tau, \mathbf{y})$.

D'après le théorème de Wick (*cf.* section III/3.3 et [WICK 1950 ; SCHWEBER 1961 ; BOGOLIUBOV and SHIRKOV 1980]), le diagramme (A.2) donne au propagateur $S_F^2((\mathbf{x}_1, \alpha_1), (\mathbf{x}_2, \alpha_2), \Delta t; (\mathbf{x}'_1, \alpha'_1), (\mathbf{x}'_2, \alpha'_2), t' = 0)$ de (III.25a) la contribution suivante (les notations sont définies après) :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}((\mathbf{x}_1, \alpha_1), (\mathbf{x}_2, \alpha_2), \Delta t; (\mathbf{x}'_1, \alpha'_1), (\mathbf{x}'_2, \alpha'_2), t' = 0) \equiv & \quad (A.3) \\ & \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 4! \frac{(-i)^4}{4!} q_e^4 \\ & \times \langle \alpha_1 | S_F((\Delta t, \mathbf{x}_1); y_3) \gamma^{\nu_3} S_F(y_3; y_2) \gamma^{\nu_2} S_F(y_2; y_1) \gamma^{\nu_1} S_F(y_1; (t' = 0, \mathbf{x}'_1)) | \alpha'_1 \rangle \\ & \times \langle \alpha_2 | S_F((\Delta t, \mathbf{x}_2); y_4) \gamma^{\nu_4} S_F(y_4; (t' = 0, \mathbf{x}'_2)) | \alpha'_2 \rangle \\ & \times [D_{\nu_4 \nu_1}(y_4; y_1) D_{\nu_3 \nu_2}(y_3; y_2)], \end{aligned}$$

qui est l'un des termes du théorème de Wick appliqué à la contribution $k = 4$ du propagateur (III.25b) (nous avons utilisé la partie électromagnétique de l'interaction \hat{H}_I^1 (II.18b), avec le courant (III.27)). Pour rendre les formules relativement simples et compactes, nous avons introduit la notation

$$\langle \alpha | \cdots | \alpha' \rangle \quad (A.4)$$

pour l'élément situé à la ligne α et à la colonne α' d'une matrice (nous l'utilisons dans (A.3) avec des matrices 4×4); on retrouve la même notation que pour les états de Fock (II.5), mais nous ne ferons usage de (A.4)

que dans les Eqs. (A.3), (A.6) et (A.7), si bien que le risque de confusion avec l'ancienne notation est nul. Nous avons aussi utilisé la notation habituelle [MOHR 1974b] $S_F(x; y)$ pour la matrice 4×4 du propagateur, dont les éléments ont déjà été définis explicitement (III.26a) :

$$\langle \alpha | S_F(x; y) | \alpha' \rangle \equiv S_F(\mathbf{x}, \alpha, x^0; \mathbf{y}, \alpha', y^0),$$

avec $x \equiv (x^0, \mathbf{x})$ et $y \equiv (y^0, \mathbf{y})$. Rappelons enfin brièvement les notations déjà introduites : q_e est la charge de l'électron (II.2), S_F le propagateur de Feynman (III.26a), les γ sont les matrices de Dirac (II.14) et D est le propagateur photonique (III.26b). D'autre part, les indices ν sont implicitement sommés de zéro à trois, tout comme dans l'interaction (II.18b).

Signature

Sans vouloir entrer dans des détails que l'on peut trouver dans des références classiques, une remarque sur la façon dont on obtient l'appariement de Wick (A.3) s'impose. Le théorème de Wick demande en effet de multiplier par ± 1 chaque appariement par contractions (III.26) des termes de (III.25b) [WICK 1950 ; SCHWEBER 1961 ; BOGOLIUBOV and SHIRKOV 1980]. Ce signe est déterminé par l'ordre dans lequel les champs de fermions apparaissent dans (A.3) par rapport à leur ordre initial dans (III.25b) : ce signe vaut la signature de la permutation (des champs $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\bar{\psi}}_I$) qui a permis de passer d'un terme du développement (III.25b) à l'appariement particulier que l'on calcule — (A.3), ici.

Il n'est pas difficile de constater que ce signe est entièrement déterminé — pour une interaction \hat{H}_I^I donnée par (II.18b) — par la façon dont le diagramme correspondant au terme de Wick étudié relie les coordonnées (ξ'_1, \dots, ξ'_N) de l'« entrée » d'un diagramme comme (A.2) aux coordonnées (ξ_1, \dots, ξ_2) de sa « sortie ». Précisément, si nous notons $\xi'_{P'(j)}$ la coordonnée reliée à la coordonnée $\xi_{P(j)}$ par une ligne de propagateurs électroniques (pour tout $j = 1, \dots, N$ qui numérote les points entre lesquels on calcule le propagateur (III.25a) et où P et P' sont des permutations de $1, \dots, N$, comme par exemple dans (III.59)), alors la signature de la permutation des champs de fermions $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\bar{\psi}}_I$ est donnée par la signature $(-1)^{PP'}$ de la permutation $P \circ P'$ — ainsi, il n'y a pas à se soucier de la façon dont on a déplacé les champs $\hat{\psi}_I$ et $\hat{\bar{\psi}}_I$ de l'interaction (II.18b) entre le développement (III.25b) et un choix particulier d'appariement comme par exemple (A.3). (Ceci est dû au fait que l'interaction (II.18b) contient un nombre *pair* de champs fermioniques — des détails peuvent être trouvés dans les références citées plus haut.) Avec les notation ci-dessus, la façon dont sont reliées les coordonnées ξ dans le diagramme (A.1) peut se décrire avec $P = \text{Id}$ et $P' = \text{Id}$, si bien que le théorème de Wick associe le signe $+1$ à ce diagramme — ce que nous avons pris en compte dans (A.3).

Le signe attribué à chaque terme par le théorème de Wick est ainsi responsable de la règle de Feynman (table III.2) qui demande d'assigner un

A/2. Dérivation de plusieurs règles

facteur $(-1)^{PP'}$ à l'expression de l'élément de matrice (III.33) — avec P et P' des permutations assignées aux états individuels reliés aux lignes externes d'un diagramme, comme indiqué p. 110.

A/2.2

Du propagateur à la fonction de Green

La définition (III.9) de la fonction de Green pour des énergies *réelles* demande de calculer la *transformée de Fourier* du propagateur à deux temps. Il apparaît donc naturel de remplacer — dans la contribution (A.3) — chaque propagateur élémentaire (III.26) par sa transformée de Fourier ; nous utilisons donc les transformées de Fourier (III.61) de ces propagateurs élémentaires :

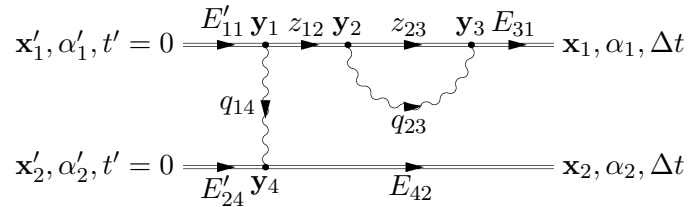
$$S_F((t, \mathbf{x}); (t', \mathbf{x}')) = \frac{1}{2\pi i} \int dE e^{-iE(t-t')} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) \gamma^0, \quad (\text{A.5a})$$

— où G et S_F sont des matrices 4×4 et où nous avons utilisé l'identité d'algèbre de Clifford des matrices de Dirac $(\gamma^0)^2 \equiv g^{00} = 1$ — et

$$D_{\mu\nu}((t, \mathbf{x}); (t', \mathbf{x}')) = \frac{1}{2\pi i} \int dq e^{-iq(t-t')} H_{\mu\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; q). \quad (\text{A.5b})$$

Nous avons utilisé dans (A.5) l'invariance par translation dans le temps des propagateurs (III.26).

Afin de remplacer les propagateurs de (A.3) par les transformées de Fourier (A.5), nous associons à chacun d'eux une « énergie virtuelle » particulière, selon le diagramme



dont les notations distinguent explicitement énergies virtuelles entrantes (E'), sortantes (E), d'électron interne (z) et de photon (q) — leurs indices indiquant les points qu'elles relient. Nous obtenons ainsi grâce aux remplacements (A.5) dans (A.3) la contribution du diagramme (A.1) au

propagateur (III.25a) :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}((\mathbf{x}_1, \alpha_1), (\mathbf{x}_2, \alpha_2), \Delta t; (\mathbf{x}'_1, \alpha'_1), (\mathbf{x}'_2, \alpha'_2), t' = 0) = & \quad (A.6) \\
 & \int dE'_{11} dz_{12} dz_{23} dE_{31} dE'_{24} dE_{42} dq_{14} dq_{23} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 \\
 & \times \exp(-i(E_{31} + E_{42})\Delta t) \exp(-i(E'_{11} - z_{12} - q_{14})y_1^0) \\
 & \times \exp(-i(z_{12} - z_{23} - q_{23})y_2^0) \exp(-i(z_{23} - E_{31} - (-q_{23}))y_3^0) \\
 & \times \exp(-i(E'_{24} + q_{14} - E_{42})y_4^0) \\
 & \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 4! \frac{(-i)^4}{4!} q_e^4 \\
 & \times \langle \alpha_1 | G(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_3; E_{31}) \alpha^{\nu_3} G(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; z_{23}) \alpha^{\nu_2} G(\mathbf{y}_2, \mathbf{y}_1; z_{12}) \alpha^{\nu_1} G(\mathbf{y}_1, \mathbf{x}'_1; E'_{11}) | \alpha'_1 \rangle \\
 & \times \langle \alpha_2 | G(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_4; E_{42}) \alpha^{\nu_4} G(\mathbf{y}_4, \mathbf{x}'_2; E'_{24}) | \alpha'_2 \rangle \\
 & \times [H_{\nu_4 \nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1, q_{14}) H_{\nu_3 \nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; q_{23})],
 \end{aligned}$$

où le facteur $\left(\frac{1}{2\pi i}\right)^8$ provient des huit propagateurs du diagramme (A.1), où la matrice γ^0 de la définition (A.5a) a transformé les matrices γ de Dirac de (A.3) en matrices α de Dirac (*cf.* (II.14)) — qu'il ne faut pas confondre avec les indices de bi-spineurs $\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1$ et α'_2 que nous utilisons (*cf.* p. 68).

Intégrations
sur les
temps

Nous avons regroupé dans (A.6) les exponentielles des transformées de Fourier (A.5) en extrayant explicitement le comportement de l'intégrande pour chacun des temps d'interaction $y_{1,\dots,4}^0$, ainsi que pour le temps de propagation Δt . La contrepartie de l'introduction d'intégrations sur les énergies virtuelles dans (A.3) est que le comportement de l'intégrande de (A.6) par rapport aux temps $y_{1,\dots,4}^0$ et Δt est extrêmement simple. Nous pouvons ainsi effectuer les intégrations sur les temps d'interaction de (A.6), ainsi que sur l'intervalle de temps de la définition de la fonction de Green (III.9) : on obtient grâce à

$$\int dt e^{-iEt} = 2\pi\delta(E)$$

(où δ est la fonction delta de Dirac) la contribution du diagramme de self énergie écrantée (A.1) à la fonction de Green (III.9) :

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{G}((\mathbf{x}_1, \alpha_1), (\mathbf{x}_2, \alpha_2); (\mathbf{x}'_1, \alpha'_1), (\mathbf{x}'_2, \alpha'_2); E \in \mathbb{R}) \quad (\text{A.7}) \\
 & \equiv \frac{1}{i} \int d\Delta t e^{iE\Delta t} \mathcal{S}((\mathbf{x}_1, \alpha_1), (\mathbf{x}_2, \alpha_2), \Delta t; (\mathbf{x}'_1, \alpha'_1), (\mathbf{x}'_2, \alpha'_2), t' = 0) \\
 & = \int dE'_{11} dz_{12} dz_{23} dE_{31} dE'_{24} dE_{42} dq_{14} dq_{23} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 \frac{1}{i} (2\pi)^5 \\
 & \quad \times \delta(E - E_{31} - E_{42}) \delta(E'_{11} - z_{12} - q_{14}) \delta(z_{12} - z_{23} - q_{23}) \\
 & \quad \times \delta(z_{23} - E_{31} - (-q_{23})) \delta(E'_{24} + q_{14} - E_{42}) \\
 & \quad \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 4! \frac{(-i)^4}{4!} q_e^4 \\
 & \quad \times \langle \alpha_1 | G(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_3; E_{31}) \alpha^{\nu_3} G(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; z_{23}) \alpha^{\nu_2} G(\mathbf{y}_2, \mathbf{y}_1; z_{12}) \alpha^{\nu_1} G(\mathbf{y}_1, \mathbf{x}'_1; E'_{11}) | \alpha'_1 \rangle \\
 & \quad \times \langle \alpha_2 | G(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_4; E_{42}) \alpha^{\nu_4} G(\mathbf{y}_4, \mathbf{x}'_2; E'_{24}) | \alpha'_2 \rangle \\
 & \quad \times [H_{\nu_4 \nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; q_{14}) H_{\nu_3 \nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; q_{23})],
 \end{aligned}$$

où le $(2\pi)^5$ provient des intégrations sur les temps des quatre points d'interaction et de la conservation globale d'énergie liée à l'intégration sur le temps de propagation Δt .

.....
 Élément de
 matrice

Comme le hamiltonien effectif (III.39a) est construit à partir d'*éléments de matrice* (III.33) de la fonction de Green — *cf.* (III.39b) et (III.39c) —, les règles de Feynman (*cf.* p. 108) donnent des contributions à ces éléments de matrice. En reprenant les notations de la section III/4.1-b, nous allons calculer la contribution du diagramme (A.1) à l'élément de matrice (III.33)

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^2(E) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle & \equiv \int d\xi_1 d\xi_2 d\xi'_2 d\xi'_1 \left\{ \phi_{n_1}^\dagger(\xi_1) \phi_{n_2}^\dagger(\xi_2) \right\} \quad (\text{A.8}) \\
 & \quad \times \mathcal{G}^2(\xi_1, \xi_2; \xi'_1, \xi'_2; E) \left\{ [\gamma^0 \phi_{n'_2}](\xi'_2) [\gamma^0 \phi_{n'_1}](\xi'_1) \right\}
 \end{aligned}$$

associé aux états propres de \hat{H}_0 (II.12)

$$|\mathbf{n}_0\rangle \equiv |n_2, n_1\rangle \quad \text{et} \quad |\mathbf{n}'_0\rangle \equiv |n'_2, n'_1\rangle, \quad (\text{A.9})$$

(où nous avons indiqué les états de Dirac des deux électrons qui composent chaque état de Fock¹).

Grâce au développement (III.62) de la fonction de Green de Dirac G (III.61a), les intégrations de l'élément de matrice (A.8) se résument à des relations d'orthogonalité (III.32) entre fonctions d'onde de Dirac. La

¹Les états $|\mathbf{n}'_0\rangle$ et $|\mathbf{n}_0\rangle$ sont en pratique des états quasi-dégénérés pour lesquels on calcule le hamiltonien effectif (III.39a).

contribution du diagramme (A.1) à (A.8) vaut donc, d'après (A.7), (III.62) et (III.32)

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}(E) \bigotimes^2 \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle = & \\
& \int dE'_{11} dz_{12} dz_{23} dE_{31} dE'_{24} dE_{42} dq_{14} dq_{23} \int d^3\mathbf{y}_1 d^3\mathbf{y}_2 d^3\mathbf{y}_3 d^3\mathbf{y}_4 \\
& \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^8 [-(2\pi i)]^5 e^4 \\
& \times \delta(E - E_{31} - E_{42}) \delta(E'_{11} - z_{12} - q_{14}) \delta(z_{12} - z_{23} - q_{23}) \\
& \quad \times \delta(z_{23} - E_{31} - (-q_{23})) \delta(E'_{24} + q_{14} - E_{42}) \\
& \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_1}^- - E_{31}} \phi_{n_1}^\dagger(\mathbf{y}_3) \alpha^{\nu_3} G(\mathbf{y}_3; \mathbf{y}_2; z_{23}) \alpha^{\nu_2} \right. \\
& \quad \left. \times G(\mathbf{y}_2; \mathbf{y}_1; z_{12}) \alpha^{\nu_1} \phi_{n'_1}(\mathbf{y}_1) \frac{1}{\varepsilon_{n'_1}^- - E'_{11}} \right) \\
& \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{n_2}^- - E_{42}} \phi_{n_2}^\dagger(\mathbf{y}_4) \alpha^{\nu_4} \phi_{n'_2}(\mathbf{y}_4) \frac{1}{\varepsilon_{n'_2}^- - E'_{24}} \right) \\
& \times [H_{\nu_4\nu_1}(\mathbf{y}_4, \mathbf{y}_1; q_{14}) H_{\nu_3\nu_2}(\mathbf{y}_3, \mathbf{y}_2; q_{23})]. \tag{A.10}
\end{aligned}$$

Dans cette expression, les dénominateurs et les fonctions d'onde propres ϕ_n de Dirac (*cf.* p. 42) proviennent directement du développement (III.62) de la fonction de Green de Dirac G (III.61a).

Le résultat (A.10) auquel nous avons abouti confirme¹ ce que nous avons obtenu avec les règles de Feynman appliquées au diagramme (III.59) (*cf.* (III.68), avec des électrons externes définis dans (III.59) par $P = \text{Id}$ et $P' = \text{Id}$).

SECTION 3 (Appendice A)

Conclusion

Le calcul de la contribution du diagramme (A.1) à l'élément de matrice (A.8) que nous venons d'effectuer justifie un grand nombre des règles de Feynman données dans ce mémoire (*cf.* p. 108). Nous avons ainsi vu apparaître les conservations exactes d'énergie aux points d'interaction — ce qui est un avantage par rapport à la méthode de Gell-Mann–Low–Sucher (*cf.* p. 58) — ainsi que l'interprétation du paramètre énergétique E de la

¹L'unique différence *formelle* entre le résultat (A.10) que nous venons de dériver et l'expression (III.68) obtenue à partir des règles de Feynman porte sur la façon dont est exprimé le fait que le paramètre E représente l'énergie virtuelle totale : $\delta(E - E_{31} - E_{42})$ dans (A.10) contre $\delta(E - E'_{11} - E'_{24})$ dans (III.68). Les conservations d'énergie aux points d'interaction assurent que ces deux fonctions sont interchangeable dans (A.10) et (III.68).

fonction de Green (III.9) comme *énergie virtuelle totale* parcourant chaque diagramme.

L'usage du théorème de Wick puis de dérivations semblables à celles de cet appendice permettent d'obtenir l'*ensemble* des règles des tables III.1 et III.2 (*cf.* p. 108). Calculer le hamiltonien effectif (III.39a) demande de savoir étudier les éléments de matrice (III.52) — tels que donnés par les règles de Feynman — dans la région intérieure au contour Γ utilisé dans les matrices K (III.39b) et P (III.39c); il faut ensuite réaliser les intégrations de contour correspondantes. J'introduis dans la section IV/3 une méthode permettant de réaliser ceci graphiquement, ce qui nécessitera d'ajouter quelques règles de Feynman supplémentaires, données dans la table IV.1 (p. 149), d'un statut complètement différent de celles que nous venons de dériver dans cet appendice.

APPENDICE B

Singularités et perturbations : preuve du théorème

SECTION 1 (Appendice B)

Position du problème

.....
Structure
analytique
et dévelop-
pement
perturbatif

La fonction de Green (III.17) possède des pôles *simples* à certaines valeurs propres du hamiltonien (II.27) de l'électrodynamique des états liés ; ces énergies *dépendent de la valeur de la constante de couplage* q_e (ou α , constante de structure fine) contenu dans l'interaction (II.26) au travers du courant (II.16). Comme nous calculerons la fonction de Green (III.9) par un développement perturbatif (III.25b) — à l'aide des règles de Feynman (*cf.* p. 108) —, il apparaît utile, pour le calcul de K (III.39b) et de P (III.39c), d'étudier la structure analytique de la fonction de Green à *chaque ordre de son développement* (en α). Je dérive dans la section B/2 la forme *générale* d'un tel développement.

.....
Intégrations
de contour
et perturba-
tions

Grâce au développement obtenu dans la section B/2, je montre ensuite (section B/3) que les intégrales (III.39b) et (III.39c) qui permettent de définir le hamiltonien effectif (III.39a) peuvent se calculer perturbativement *sans avoir à connaître* le contour Γ qui les définit. Les démonstrations de cet appendice ont donc d'importantes conséquences pratiques, qui sont détaillées dans la section IV/2.

.....
Applications

Nous ne tentons pas d'être strictement rigoureux : notre but est simplement de justifier les calculs perturbatifs du hamiltonien effectif (III.39a) effectués dans le chapitre V, car ils sont fondés sur les propriétés analytiques du développement en α de la fonction de Green à deux temps (III.17) — et de justifier mieux, par la même occasion, les calculs déjà publiés sur la méthode de la fonction de Green à deux temps.

Notations

Nous reprenons dans cet appendice les notations définies dans la section IV/2.2-a : nous considérons une fonction modèle g_α qui possède par définition un ensemble de pôles *simples*, dont nous isolons s pôles particuliers (dans la section III/4.2, il s'agit des états atomiques dégénérés ou quasi-dégénérés qui nous intéressent) situés aux positions $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$), où les énergies non perturbées $E_k^{(0)}$ sont déplacées par des corrections $\Delta E_{\alpha,k} = \mathcal{O}(\alpha)$. La fonction modèle¹ g_α peut donc s'écrire sous la forme

$$g_\alpha(E) = \left[\sum_{k=1}^s \frac{r_{\alpha,k}(E)}{E - (E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})} \right] + R_\alpha(E), \quad (\text{B.1})$$

où les $r_{\alpha,k}$ et R_α sont *régulières* aux s pôles $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$.

SECTION 2 (Appendice B)

Structure analytique perturbative

Forme générale du développement

J'obtiens dans cette section la structure analytique du développement perturbatif de la fonction modèle g_α (B.1). Celui-ci s'écrit grâce à un développement de Taylor :

$$g_\alpha(E) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \alpha^j \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} g_\alpha(E), \quad (\text{B.2})$$

où nous introduisons la notation

$$\partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0}$$

pour désigner la dérivée j -ème par rapport à α , prise en $\alpha = 0$. Afin de faire apparaître des pôles aux énergies *non perturbées*, j'exprime par une série les pôles exacts singularisés dans (B.1) :

$$\frac{r_{\alpha,k}(E)}{E - (E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})} = r_{\alpha,k}(E) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\Delta E_{\alpha,k}^l}{(E - E_k^{(0)})^{l+1}} \quad (\text{B.3})$$

(qui est valable pour E suffisamment éloigné de $E_k^{(0)}$: $|E - E_k^{(0)}| > \Delta E_{\alpha,k}$), si bien que le développement de Taylor (B.2) s'écrit plus explicitement, avec (B.1) et (B.3)

$$g_\alpha(E) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \alpha^j \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} \left\{ \left[\sum_{k=1}^s r_{\alpha,k}(E) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\Delta E_{\alpha,k}^l}{(E - E_k^{(0)})^{l+1}} \right] + R_\alpha(E) \right\}. \quad (\text{B.4})$$

¹La fonction g_α possède autour des énergies $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$) la même structure analytique que la fonction de Green (III.17), ce qui nous permettra d'appliquer les résultats de cet appendice à la fonction de Green (*cf.* section IV/2.3).

Ce développement ne montre *pas* de façon évidente que le développement perturbatif de g_α (B.1) possède à chaque ordre en α des singularités aux énergies non perturbées $E_{1,\dots,s}^{(0)}$: en effet, le développement (B.3) aurait pu être réalisé en un autre point que $E = E_k^{(0)}$ — le nombre *infini* de termes dans (B.3) ne permet pas de faire de chaque terme un pôle du membre de gauche.

Pendant, on peut exploiter le caractère *perturbatif* des déplacements en énergie $\Delta E_{\alpha,k}$: en supposant les $r_{\alpha,k}$ suffisamment régulières en α , l'hypothèse $\Delta E_{\alpha,k} = \mathcal{O}(\alpha)$ impose dans (B.4) que $[r_{\alpha,k}(E) \Delta E_{\alpha,k}^l] = \mathcal{O}(\alpha^l)$; en conséquence, seuls des termes de (B.3) en nombre *fini* contribuent à chaque dérivée $\partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0}$ du développement de Taylor (B.4). Précisément, seuls $j + 1$ termes de (B.3) sont non nuls après j dérivations :

$$g_\alpha(E) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \alpha^j \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} \left\{ \left[\sum_{k=1}^s r_{\alpha,k}(E) \sum_{l=0}^j \frac{\Delta E_{\alpha,k}^l}{(E - E_k^{(0)})^{l+1}} \right] + R_\alpha(E) \right\}. \quad (\text{B.5a})$$

Les fonctions $r_{\alpha,k}$ et R_α de cette équation étant par hypothèse régulières aux s pôles qui nous intéressent, nous supposons que c'est aussi le cas de leurs dérivées par rapport à α . En d'autres termes, nous obtenons pour $g_\alpha(E)$ un développement de la forme

$$g_\alpha(E) = \left\{ \left[\sum_{k=1}^s \frac{r_{\alpha=0,k}(E)}{E - E_k^{(0)}} \right] + R_{\alpha=0}(E) \right\} + \alpha \left\{ \left[\sum_{k=1}^s \frac{\dots}{E - E_k^{(0)}} \right] + \left[\sum_{k=1}^s \frac{\dots}{(E - E_k^{(0)})^2} \right] + \dots \right\} + \dots \quad (\text{B.5b})$$

où seuls les dénominateurs sont singuliers aux énergies non perturbées $E_k^{(0)}$. Maintenant que grâce à (B.5) les sommes sur l de (B.4) contiennent explicitement un nombre *fini* de termes, on voit que chaque terme du développement perturbatif de $g_\alpha(E)$ possède des pôles aux énergies *non perturbées*¹ — qui se compensent par sommation sur α , puisque la fonction modèle g_α des premiers membres des Eqs. (B.5) possède, elle, des singularités aux énergies *exactes* $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$.

¹Le développement (B.3) n'était valable que pour certaines énergies E suffisamment éloignées des $E_{1,\dots,s}^{(0)}$, mais nous pouvons relaxer cette restriction en observant que le nombre fini de termes à chaque ordre i permet de les prolonger analytiquement dans la zone où les développements (B.3) ne s'appliquent pas.

Non unicité
du dévelop-
pement

Le développement perturbatif (B.5a) de g_α n'est *pas unique*, car les fonctions régulières $r_{\alpha,k}$ et R_α de (B.1) ne le sont elles-mêmes pas : sans changer g_α , on peut par exemple ajouter $E - (E_{k_0}^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k_0})$ à $r_{\alpha,k_0}(E)$, tout en retranchant $E - (E_{k_1}^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k_1})$ à $r_{\alpha,k_1}(E)$. J'ai choisi malgré cela de ne pas écrire la fonction modèle g_α sous une forme plus restrictive (avec, par exemple, le résidu de $g_\alpha(E)$ en $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ à la place de chaque fonction $r_{\alpha,k}(E)$) car les calculs perturbatifs concrets de la fonction de Green (III.17) mènent en pratique toujours à un développement de la forme (B.5a) pour des fonctions $r_{\alpha,k}(E)$ et $R_\alpha(E)$ particulières. On peut cependant légitimement se demander si le développement perturbatif (B.5a) de g_α donne *tous* les développements perturbatifs en α de la fonction de Green (III.9) auxquels on peut aboutir ; nous supposons que c'est toujours le cas : nous tiendrons la forme (B.5a) pour générale (une hypothèse similaire peut être trouvée dans YENNIE [1989]).

SECTION 3 (Appendice B)

Intégrations de contour et perturbations

Contour
« exact »

Le hamiltonien effectif (III.39a) se calcule à partir d'intégrales (III.39b) et (III.39c) de fonctions possédant des pôles aux énergie exactes (*cf.* (III.17) et section III/4.1). Or les intégrandes des matrices K (III.39b) et P (III.39c) sont de la forme de notre fonction modèle (B.1). Nous allons donc évaluer l'intégrale de $g_\alpha(E)$ sur un contour Γ_α encerclant une fois chacune des s énergies exactes $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ (*cf.* figure III.7) ; le résultat de l'intégration vaut¹, par le théorème des résidus appliqué à (B.1),

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_\alpha} dE g_\alpha(E) = \sum_{k=1}^s r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}), \quad (\text{B.6})$$

où nous avons pris en compte la régularité des fonctions $r_{\alpha,k}$ et R_α aux énergies exactes $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ encerclées par Γ_α .

¹Bien que les $r_{\alpha,k}$ de (B.1) ne soient pas uniques (à g_α donnée), les *résidus* $r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})$ le sont, ce qui montre que (B.6) est correctement déterminée par la fonction g_α seule.

Réponse au
problème de
contour

Le problème d'intégration posé p. 120 peut maintenant s'exprimer de la façon suivante : comment évaluer l'expression théorique (B.6) (*i. e.* les matrices K et P sous la forme (III.42)) à l'aide du développement perturbatif (B.5) (*i. e.* du développement *perturbatif* (III.49) des matrices K et P) ? La réponse est simple, en pratique : pour calculer *perturbativement* l'intégrale de notre fonction modèle $g_\alpha(E)$ sur un contour Γ_α encerclant les énergies exactes $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$, il faut *changer de contour*, en utilisant pour chaque terme du développement perturbatif (B.5) un *autre* contour, Γ_0 , qui encercle par définition une fois chaque énergie *non perturbée* $E_k^{(0)}$ dans le sens positif (c'est-à-dire que deux contours *différents* — utilisés sur des quantités respectivement exactes et perturbatives — donnent le *même* résultat).

Contour
« non
perturbé »

En partant du développement perturbatif (B.5a), nous prouvons qu'on obtient la valeur (B.6) en intégrant chaque terme du développement (B.5) non pas sur Γ_α comme dans (B.6), mais sur Γ_0 , qui encercle par définition chacune des énergies *non perturbées* $E_k^{(0)}$. L'intégration sur Γ_0 de chaque terme d'ordre α^j de (B.5a) donne par la formule de Cauchy (en notant $r_{\alpha,k}^{(l)}(E)$ la dérivée l -ième de $r_{\alpha,k}(E)$ par rapport à E)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{j!} \alpha^j \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE \left\{ \sum_{k=1}^s \sum_{l=0}^j \left[\frac{\partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} \left[r_{\alpha,k}(E) \Delta E_{\alpha,k}^l \right]}{(E - E_k^{(0)})^{l+1}} \right] + \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} R_\alpha(E) \right\} \\ & = \frac{1}{j!} \alpha^j \left\{ \sum_{k=1}^s \sum_{l=0}^j \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} \left[\frac{1}{l!} r_{\alpha,k}^{(l)}(E_k^{(0)}) \Delta E_{\alpha,k}^l \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.7a})$$

où nous avons une fois de plus utilisé la régularité des fonctions $r_{\alpha,k}(E)$ et $R_\alpha(E)$ et de leurs dérivées par rapport à α aux énergies $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ (pour $\alpha = 0$).

Pour voir l'effet de l'intégration (B.7a), nous utilisons à nouveau le caractère perturbatif des $\Delta E_{\alpha,k} = \mathcal{O}(\alpha)$, qui donne que $\partial_\alpha^{j>l} \Big|_{\alpha=0} \left[r_{\alpha,k}^{(l)}(E) \Delta E_{\alpha,k}^l \right] = 0$, si bien qu'il est inutile de restreindre la somme sur l dans (B.7a)

$$(\text{B.7a}) = \frac{1}{j!} \alpha^j \left\{ \sum_{k=1}^s \sum_{l=0}^{\infty} \partial_\alpha^j \Big|_{\alpha=0} \left[\frac{1}{l!} r_{\alpha,k}^{(l)}(E_k^{(0)}) \Delta E_{\alpha,k}^l \right] \right\}. \quad (\text{B.7b})$$

On reconnaît maintenant que la somme sur l est un développement de Taylor de $r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})$ autour de $E_k^{(0)}$, si bien que

$$(B.7b) = \frac{1}{j!} \alpha^j \left\{ \sum_{k=1}^s \partial_{\alpha}^j |_{\alpha=0} [r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})] \right\}. \quad (B.7c)$$

Ceci montre qu'à chaque ordre j en α du développement général (B.5), réaliser une intégration (B.7a) sur Γ_0 redonne une quantité *indépendante* du choix des fonctions $r_{\alpha,k}$ et R_{α} de (B.1), puisque l'on reconnaît dans (B.7c) les résidus $r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})$ de $g_{\alpha}(E)$ aux pôles $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$; en d'autres termes, quel que soit le choix des $r_{\alpha,k}$ et de R_{α} dans le développement (B.5a) de la fonction g_{α} , une intégration de chaque ordre *sur* Γ_0 donne une valeur *unique* (B.7c) définie par la fonction modèle exacte g_{α} .

La sommation à tous les ordres j en α des termes (B.7c) — termes obtenus après intégration sur Γ_0 de chaque terme de (B.5) — s'obtient en reconnaissant un développement de Taylor :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \alpha^j \left\{ \sum_{k=1}^s \partial_{\alpha}^j |_{\alpha=0} [r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k})] \right\} \\ &= \sum_{k=1}^s r_{\alpha,k}(E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}). \end{aligned} \quad (B.7d)$$

En conclusion, bien que nous ayons réalisé dans les Eqs. (B.7) une intégration de chaque terme du développement perturbatif (B.5) de g_{α} sur le contour « *non perturbé* » Γ_0 (qui encercle une fois chaque énergie non perturbée $E_k^{(0)}$), nous retrouvons dans (B.7d) exactement le *même résultat* (B.6) que celui obtenu par une intégration de la fonction modèle g_{α} sur un *autre* contour, Γ_{α} (qui encercle une fois chaque énergie exacte $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$).

Conclusion

J'ai prouvé dans cet appendice deux résultats *généraux* sur les propriétés analytiques d'une fonction $g_{\alpha}(E)$ (B.1) possédant un certain nombre de pôles simples en $E = E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$), dont la position dépend d'un paramètre α . Le premier est la structure analytique (B.5b) de son développement perturbatif en α . Nous y observons que les pôles simples de $g_{\alpha}(E)$ (B.1), situés en $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$ ($k = 1, \dots, s$), subissent par développement deux transformations : d'une part ils sont *translatés*, jusqu'aux positions "non perturbées" $E_k^{(0)}$ ($k = 1, \dots, s$); d'autre part, ils donnent naissance à des pôles d'ordre supérieur qui ne sont pas présents dans la fonction "exacte" $g_{\alpha}(E)$ (B.1). Un tel comportement généralise le cas bien

connu du développement de la résolvante — *cf.* (IV.3). Le second résultat que nous avons obtenu dans cet appendice donne un moyen de calculer *perturbativement* certaines intégrations de contour sur une fonction possédant des pôles simples, comme $g_\alpha(E)$ (B.1) : si l'on écrit le développement perturbatif (B.2) comme

$$g_\alpha(E) = \sum_{j=0}^{\infty} g_{(j)}(E)$$

(où $g_{(j)}(E) \equiv \frac{1}{j!} \alpha^j \left. \partial_\alpha^j \right|_{\alpha=0} g_\alpha(E)$), la dérivation (B.6)–(B.7d) montre que

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_\alpha} dE \sum_{j=0}^{\infty} g_{(j)}(E) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_0} dE g_{(j)}(E), \quad (\text{B.8})$$

où l'on aura noté les deux contours sont différents. Intégration de contour et développement perturbatif *ne commutent donc pas*, pour une fonction à pôles simples de la forme générale (B.1) ; le résultat (B.8) montre qu'il est cependant possible de calculer perturbativement l'intégrale sur le contour « exact » Γ_α (qui entoure les $E_k^{(0)} + \Delta E_{\alpha,k}$) grâce à l'utilisation d'un autre contour, « non perturbé », Γ_0 (qui entoure les $E_k^{(0)}$) — *cf.* figure IV.3, p. 129.

Nous discutons de ces résultats et de leur application au calcul du hamiltonien effectif (III.39a) dans les sections IV/2 et IV/2.3.

B/4. Conclusion

APPENDICE C

Étude des propriétés analytiques des diagrammes

SECTION 1 (Appendice C)

Introduction

Diagrammes
standard

Lorsque l'on calcule perturbativement les éléments de matrice de fonction de Green $\langle \mathbf{n}_0 | \mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0 | \mathbf{n}'_0 \rangle$ (III.33) grâce à des diagrammes de Feynman (*cf.* section III/3), chacun des termes du développement possède des singularités (en E) aux énergies propres du hamiltonien *non perturbé* \hat{H}_0 (II.12), conformément à mes résultats généraux¹ de la section IV/2.

Nous allons voir exactement d'où proviennent ces pôles : pour un diagramme \mathcal{D} donné, chaque façon d'ordonner les instants auxquels sont placés ses points d'interaction, combinée à un choix particulier d'état propre pour chaque propagateur (électronique ou photonique), donne *un* ensemble particulier de pôles, que nous allons préciser (*cf.* section IV/3.3-b).

Des calculs semblables à ceux que je propose ici peuvent être trouvés dans deux références récentes [SHABAEV 2000, 2002], où ils ont été donnés *pour la première fois* près de dix ans après les premières publications en langue anglaise de la méthode de la fonction de Green à deux temps [SHABAEV 1990a] — alors qu'ils sont pratiquement indispensables pour obtenir facilement le hamiltonien effectif (III.39a). On trouve d'autre part dans STERMAN [1993, Chap. 13] et dans BJORKEN and DRELL [1965, § 18.6] des études de propriétés analytiques de quantités similaires à la fonction de Green en énergie (III.10).

¹Ceci se produit bien que la fonction de Green \mathcal{G}^N (III.9) soit définie à partir de champs *qui subissent l'interaction* \hat{H}_S^I (II.26) et possède en conséquence des pôles aux énergies *exactes*.

Diagrammes
à particule
fantôme

Lorsque l'on applique les transformations de la méthode de la particule fantôme (*cf.* section IV/3) aux diagrammes du développement perturbatif (III.48) de la fonction de Green, des fonctions de Green modifiées par des « propagateurs fantômes » apparaissent. Les diagrammes à propagateurs fantômes par lesquels on peut dessiner ces fonction de Green modifiées possèdent *eux aussi* une structure analytique simple, ce que je prouve dans cet appendice.

SECTION 2 (Appendice C)

Fonctions à étudier

Afin d'exhiber les propriétés analytiques de la fonction de Green (III.10), nous allons effectuer une dérivation fondée sur la définition (III.9) de la fonction de Green en énergie, mais qui suit une voie tout autre que celle qui a mené aux règles de Feynman dans l'appendice A — où nous avons *aussi* exprimé les termes perturbatifs de la fonction de Green, mais pour obtenir une forme finalement plus adaptée aux calculs *numériques* du hamiltonien effectif (III.39a). La dérivation que nous suivons ici a pour seul intérêt de faire apparaître explicitement la *structure analytique* donnée par un diagramme \mathcal{D} aux termes perturbatifs de la fonction de Green en énergie (III.48).

C/2.1

Fonction de Green sans propagateur fantôme

Contribution
à la fonction
de Green

Nous partons de la définition (III.9) de la fonction de Green (pour des énergies réelles) :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^N(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; E \in \mathbb{R}) \\ \equiv \frac{1}{i} \int d\Delta t e^{iE\Delta t} S_F^N(\xi_1, \dots, \xi_N, \Delta t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t' = 0). \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Nous avons vu dans la section III/3.1 que le propagateur à deux temps S_F^N contenu dans cette définition peut se calculer perturbativement avec :

$$\begin{aligned} S_F^N(\xi_1, \dots, \xi_N, t; \xi'_1, \dots, \xi'_N, t') \\ = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \times \\ \langle 0 | T \left\{ [\hat{\psi}_1(\xi_1, t) \cdots \hat{\psi}_1(\xi_N, t)] [\hat{\psi}_1(\xi'_N, t') \cdots \hat{\psi}_1(\xi'_1, t')] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \hat{H}_I^1(\tau) \right]^k \right\} | 0 \rangle_c \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

(où nous avons imposé $\hbar = 1$).

D'après le théorème de Wick, on peut décomposer chaque terme d'ordre k contenu dans le développement (C.2) en produits de propagateurs, que l'on peut représenter par des diagrammes de Feynman (*cf.* section III/3.3). Ainsi, chaque diagramme de Feynman \mathcal{D} donne à (C.2) une contribution de la forme

$$\frac{(-i)^k}{k!} \int d\tau_1 \cdots d\tau_k [\cdots \mathbf{p}_1(\tau_1, t') \cdots \mathbf{p}_2(\tau_2, \tau_1) \cdots] \quad (\text{C.3})$$

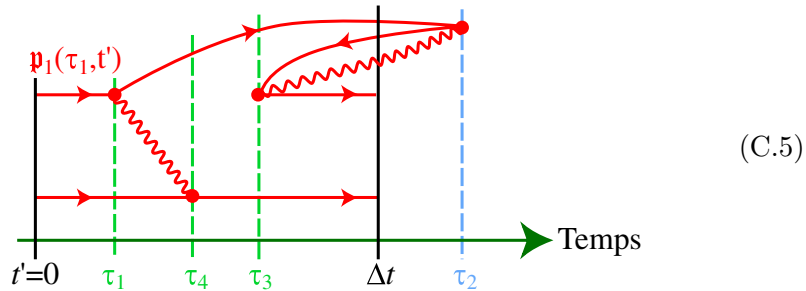
où nous avons représenté par \mathbf{p} les propagateurs élémentaires (III.26) (électronique S_F ou photonique D) qui proviennent de l'usage du théorème de Wick (*cf.* section III/3.3); comme nous n'allons avoir besoin que du comportement des propagateurs (III.26) *par rapport au temps*, nous n'avons pas précisé, dans (C.3), les matrices gamma de Dirac, *etc.* qui permettent d'obtenir la contribution exacte d'un diagramme au propagateur (C.2) : un exemple complet d'application du théorème de Wick peut être trouvé par exemple dans l'Eq. (A.3).

Fonction à
étudier

D'après (C.1) et (C.3), il nous faut donc obtenir les singularités en E de

$$\frac{1}{i} \int d\Delta t e^{iE\Delta t} \frac{(-i)^k}{k!} \int d\tau_1 \cdots d\tau_k [\cdots \mathbf{p}_1(\tau_1, t') \cdots \mathbf{p}_2(\tau_2, \tau_1) \cdots], \quad (\text{C.4})$$

où les \mathbf{p} sont des propagateurs élémentaires S_F ou D — *cf.* (III.26). (Nous ne nous encombrons pas des facteurs numériques dans la suite.) Par exemple, le diagramme de self énergie écrantée



(pour lequel nous avons représenté un ordonnancement particulier des temps d'interaction) donnerait un terme (C.4) qui contient *huit* propagateurs \mathbf{p} (six propagateurs électroniques et deux propagateurs photoniques).

Fonctions de Green avec propagateurs fantômes

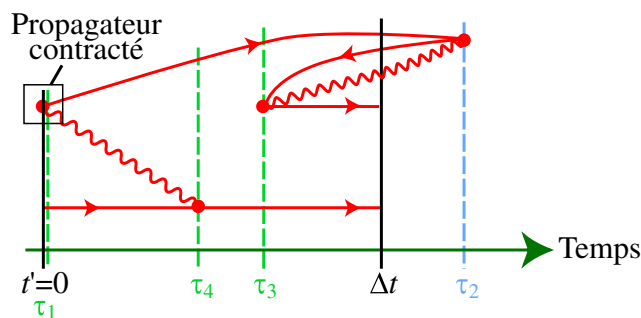
Remplacement de propagateurs

Afin de prouver les résultats que j'ai annoncés dans la section IV/3.3-e sur les propriétés analytiques de diagrammes contenant des propagateurs fantômes, il nous faut aussi considérer les cas où certains des propagateurs \mathfrak{p} de (C.4) ont été transformés en propagateurs fantômes¹. D'après l'appendice A et l'Eq. (IV.25b), un propagateur fantôme $\mathfrak{p}'(t', t)$ possède une dépendance en temps très simple, donnée par une fonction de Dirac : $\mathfrak{p}'(t', t) \propto \delta(t - t')$.

Le remplacement de certains propagateurs du terme (C.4) de S_F^N (C.2) a donc pour effet de *faire disparaître certains des temps* sur lesquels on intègre dans (C.4) (en utilisant toutes les fonctions delta de Dirac pour réaliser des intégrations). Deux cas se présentent alors, suivant que les fonctions delta de Dirac font disparaître ou non le facteur exponentiel de (C.4), c'est-à-dire suivant que le temps Δt auquel arrivent les électrons est forcé ou non à zéro par les fonctions delta de Dirac. Si le facteur exponentiel de (C.4) est supprimé, cela signifie que le diagramme considéré donne aux éléments de matrice de la fonction de Green une contribution *indépendante* du paramètre E — qui est donc analytique en E .

Représentation graphique

Ces deux cas se distinguent aisément de façon *graphique* : si l'un des propagateurs de (C.4), disons $\mathfrak{p}(\tau_1, t' = 0)$ — qui est dessiné dans (C.5) — est remplacé par un propagateur fantôme alors on peut représenter graphiquement l'effet de la fonction $\delta(\tau_1 - t')$ de sa dépendance en temps en *contractant* en un *unique* instant les temps τ_1 et t' , ce qui donne le diagramme suivant :



où nous posons que les instants $t' = 0$ et τ_1 doivent être *confondus*. Grâce à cet exemple, on voit que le temps Δt sera forcé de prendre la valeur nulle — ce qui est équivalent à faire disparaître le facteur exponentiel de (C.4) — si (et seulement si) une série de propagateurs fantômes joint les temps $t' = 0$ et Δt . Ceci prouve le résultat annoncé p. 154 sur la régularité analytique

¹En d'autres termes, j'étudie les propriétés analytiques de fonctions un peu *plus générales* que la fonction de Green en énergie (C.1).

des diagrammes où l'une des « lignes électroniques¹ » a été entièrement remplacée par des propagateurs fantômes.

Fonction à
étudier

Il ne nous reste donc plus qu'à étudier les propriétés analytiques de (C.4) dans le cas où le facteur exponentiel de (C.4) ne disparaît pas, malgré le remplacement de certains propagateurs électroniques ou photoniques par des propagateurs fantômes (qui contiennent des fonctions delta de Dirac). Dans ce cas, nous notons $t_{i=0,\dots,k'}$ (où $0 \leq k' < k$) les temps d'intégration qui subsistent dans (C.4), si bien qu'il nous reste à étudier les propriétés analytiques de la « fonction de Green généralisée » (aux diagrammes à particule fantôme) :

$$g_{\mathcal{D}}(E) = \int dt_0 \cdots dt_{k'} e^{iEt_0} [\cdots \mathbf{p}_2(t_2, t_0) \cdots \mathbf{p}_3(t_3, t_2) \cdots], \quad (\text{C.6})$$

où les \mathbf{p} sont toujours de propagateurs élémentaires (III.26) (seuls ceux qui n'ont pas été remplacés par un propagateur fantôme subsistent), et où nous avons réservé la notation t_0 au temps total de propagation — des fonctions delta de Dirac peuvent avoir permis de supprimer le temps Δt de l'intégrale (C.4). La fonction $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) représente la valeur mathématique d'un diagramme \mathcal{D} à *particule fantôme* (cf. section IV/3) — tels que ceux que nous manipulons tout au long du chapitre V.

SECTION 3 (Appendice C)

Forme commune aux propagateurs élémentaires

Afin d'évaluer les propriétés analytiques en E de la valeur mathématique (C.4) d'un diagramme \mathcal{D} , il est nécessaire de connaître la dépendance en temps des propagateurs élémentaires \mathbf{p} que (C.4) contient — nous rappelons que \mathbf{p} symbolise un propagateur électronique S_F (III.26a) ou photonique D (III.26b). Nous allons voir que la forme de l'évolution temporelle de ces deux propagateurs est *identique*² — et relativement simple —, ce qui nous permettra d'effectuer toutes les intégrations sur les temps contenues dans la fonction $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) à étudier.

¹Conformément à notre discussion de la méthode de la particule fantôme (section IV/3.3-c), nous n'avons besoin, dans la pratique, que de remplacer des propagateur *électroniques* par des propagateurs fantômes.

²Ceci est au moins vrai lorsque l'on utilise la jauge de Feynman dans le propagateur photonique.

C/3. Forme commune aux propagateurs élémentaires

.....
 Propagateur électronique Le propagateur électronique S_F (III.26a) possède un comportement en temps relativement simple [MOHR 1985] :

$$S_F(\xi, t; \xi', t') = \begin{cases} \sum_{\varepsilon_n > 0} e^{-i|\varepsilon_n||t-t'|} \phi_n(\xi) \bar{\phi}_n(\xi') & \text{si } t > t' \\ - \sum_{\varepsilon_n < 0} e^{-i|\varepsilon_n||t-t'|} \phi_n(\xi) \bar{\phi}_n(\xi') & \text{si } t < t' \end{cases} \quad (\text{C.7a})$$

qui est un cas particulier¹ de (III.12) (pour une interaction \hat{H}_S^I (II.26) fixée à zéro, et pour la propagation d'une seule particule). Nous rappelons que ε_n est l'énergie propre de l'état de Dirac ϕ_n (*cf.* section II/1.2-a).

.....
 Propagateur photonique Le propagateur photonique D possède en jauge de Feynman une structure en temps similaire à celle du propagateur électronique (C.7a). En effet, on obtient grâce à la transformée de Fourier (III.61b) de la représentation spectrale (III.64) que

$$D_{\mu\nu}((t, \mathbf{x}); (t', \mathbf{x}')) = g_{\mu\nu} \frac{-1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} e^{-i\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}|t-t'|} \frac{1}{2(\mathbf{k}^2 + \mu^2)} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \quad (\text{C.7b})$$

où l'on reconnaît comme dans le cas (C.7a) de l'électron une somme sur les états propres (ici les vecteurs d'onde \mathbf{k} des photons) et une dépendance exponentielle en $-i\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}|t-t'|$, avec un facteur $\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}$ donnant l'énergie d'un photon de vecteur d'onde k (et de masse μ — *cf.* section IV/3.3-b).

.....
 Forme commune Nous obtenons donc grâce aux propagateurs électronique (C.7a) et photonique (C.7b) la forme générale des propagateurs \mathfrak{p} sur lesquels il nous faut intégrer pour obtenir $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) :

$$\mathfrak{p}(t, t') = \sum_n \mathfrak{p}^{(n)}(t, t'), \quad (\text{C.8})$$

avec

$$\mathfrak{p}^{(n)}(t, t') \propto e^{-i|\varepsilon_n||t-t'|}, \quad (\text{C.9})$$

où ε_n représente l'énergie de l'état propre n (*i. e.*, soit une énergie de Dirac ε_n , soit une énergie de photon $\sqrt{\mathbf{k}_n^2 + \mu^2}$, où \mathbf{k}_n est le vecteur d'onde du photon noté ici n).

¹On peut aussi obtenir (C.7a) à partir de la transformée de Fourier (III.61a) et de la représentation spectrale (III.62).

Choix d'un ordonnancement temporel et d'états propres

.....

Ordonnancement temporel Dans la fonction $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) dont on cherche les propriétés analytiques (qui donnent celles du diagramme de Feynman \mathcal{D} équivalent), il est utile de séparer le domaine d'intégration $\mathbb{R}^{k'+1}$ en plusieurs parties, distinguées chacune par un ordonnancement temporel particulier. En effet, suivant l'ordre des deux temps t et t' d'un propagateur électroniques $\mathbf{p}(t, t')$ (C.7a), les états qui y contribuent sont soit seulement les électrons n ($\varepsilon_n > 0$), soit seulement les positrons n ($\varepsilon_n < 0$). Nous séparons donc la fonction à étudier (C.6) en différentes contributions spécifiées par une permutation σ de $\{0, \dots, k'\}$:

$$g_{\mathcal{D}}(E) = \sum_{\sigma} g_{\mathcal{D}}^{\sigma}(E), \quad (\text{C.10})$$

où

$$g_{\mathcal{D}}^{\sigma}(E) \equiv \int_{t_{\sigma(0)} < t_{\sigma(1)} < \dots} dt_0 \dots dt_{k'} e^{iEt_0} [\dots \mathbf{p}_2(t_2, t_0) \dots \mathbf{p}_3(t_3, t_2) \dots]. \quad (\text{C.11})$$

.....

États propres individuels

Afin de pouvoir effectuer de façon simple les intégrations contenues dans (C.11), nous développons les propagateurs sur les états propres des décompositions (C.7); nous décomposons donc la contribution (C.11) de chaque ordonnancement temporel en termes associés à *un* choix d'état propre pour chaque propagateur :

$$g_{\mathcal{D}}^{\sigma}(E) = \sum_{n_1, n_2, \dots} g_{\mathcal{D}; n_1, n_2, \dots}^{\sigma}(E) \quad (\text{C.12})$$

avec

$$g_{\mathcal{D}; n_1, n_2, \dots}^{\sigma}(E) \equiv \int_{t_{\sigma(0)} < t_{\sigma(1)} < \dots} dt_0 \dots dt_{k'} e^{iEt_0} [\dots \mathbf{p}_2^{(n_2)}(t_2, t_0) \dots \mathbf{p}_3^{(n_3)}(t_3, t_2) \dots], \quad (\text{C.13})$$

où la notation $\mathbf{p}_i^{(n_i)}$ représente comme dans (C.8) le terme du propagateur \mathbf{p}_i — *i. e.* (C.7a) ou (C.7b) — provenant de l'état propre n_i (où n_i représente soit un état propre de Dirac, soit un état propre de photon, *i. e.* un vecteur d'onde).

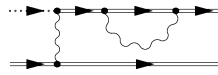
Dans (C.12), la sommation sur les états propres est contrainte par l'ordonnancement temporel défini par la permutation σ dans (C.11) : cet ordonnancement temporel force les propagateurs électroniques de (C.11) à

C/4. Choix d'un ordonnancement temporel et d'états propres

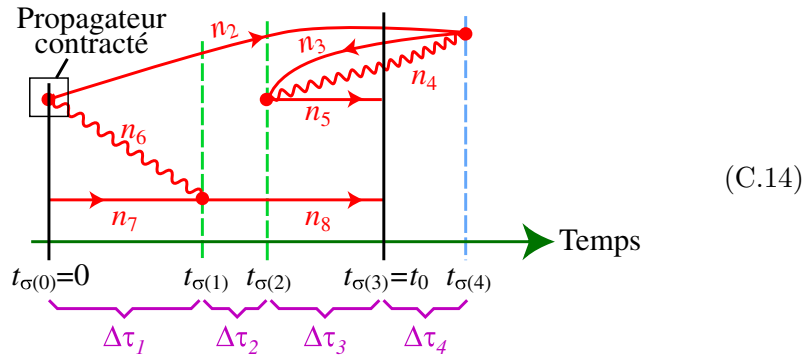
contenir *soit* une somme sur les électrons, *soit* une somme sur les positrons — cf. (C.7a). En conséquence, pour les propagateurs *électroniques* $\mathbf{p}_i(t, t')$ de (C.11), la somme sur l'état n_i que l'on sélectionne dans (C.12) ne comporte que des états d'énergie positive si $t > t'$, et que des états d'énergie négative si $t < t'$ — cf. (C.7a).

Représentation
graphique

Les sélections de termes que nous venons d'effectuer sur la fonction $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) — (C.10) et (C.12) — peuvent être résumées graphiquement. Pour un diagramme de Feynman \mathcal{D} à particule fantôme, je propose la représentation suivante, illustrée sur un exemple. Le diagramme \mathcal{D} à particule fantôme suivant (cf. section IV/3.3-e)



donne à $g_{\mathcal{D}}$ (C.10) de nombreux termes $g_{\mathcal{D};n_1,n_2,\dots}^{\sigma}(E)$ (C.13); chacun d'entre eux peut être représenté par un diagramme semblable à



où l'état propre sélectionné dans chaque propagateur (C.7) est indiqué explicitement. Les flèches proviennent de l'application du théorème de Wick, qui impose d'associer les propagateurs suivant une structure particulière liée à la forme des interactions — cf. section III/3.3.

Un diagramme comme (C.14) permet de visualiser aisément les choix possibles d'ordonnancement temporel (σ) et d'états propres (n_1, n_2, \dots) effectués dans un terme individuel (C.13). L'ordre des temps dans les propagateurs $\mathbf{p}_i(t, t')$ de (C.11) s'y voit immédiatement, ce qui permet de savoir sur quels états (électroniques ou positroniques) il convient de restreindre les sommes de (C.12); par exemple, dans le terme (C.13) représenté par le graphique (C.14), l'état n_2 doit être un état *positronique*.

Notons une restriction supplémentaire (cf. section IV/3.3-b) sur les états sommés dans (C.12), qui apparaît lorsqu'on prend grâce à la définition (III.33) des *éléments de matrice* de la fonction de Green : comme indiqué dans la table III.1 (p. 108) des règles de Feynman, chaque propagateur *externe* de la *fonction* de Green (III.10) est restreint (par projection) à

un seul terme — cf. (IV.11a) — : celui de l'état de Dirac auquel il est relié (et qui est déterminé par la définition de l'élément de matrice étudié) — voir la section III/5.2-d et la section A/2.2. En conséquence, pour connaître les propriétés analytiques qu'un diagramme donne à un *élément de matrice* (III.33) de la fonction de Green \mathcal{G}^N , il suffit de *fixer* dans (C.12) l'état de Dirac retenu dans chaque propagateur externe (C.7a). Je présente dans la section IV/3.3-b un exemple d'analyse des singularités d'un *élément de matrice* de la fonction de Green, qui mène à une analyse encore plus simple que celle de la fonction de Green, puisque les états des propagateurs externes sont fixés.

SECTION 5 (Appendice C)

Propriétés analytiques

.....
Changement
de variable

Maintenant que nous avons décomposé la fonction à étudier $g_{\mathcal{D}}(E)$ (C.6) en termes individuels $g_{\mathcal{D};n_1,n_2,\dots}^{\sigma}(E)$, nous pouvons effectuer les intégrations sur le temps contenues dans (C.12). Comme les temps de (C.12) sont ordonnés (par la permutation σ), il est pratique d'effectuer dans (C.12) un *changement de variable* [SHABAEV 2000, 2002] sur tous les temps : nous introduisons les *intervalles de temps*

$$\Delta\tau_l \equiv t_{\sigma(l)-\sigma(l-1)} > 0 \quad (\text{C.15})$$

pour $l = 1, \dots, k'$. Nous avons représenté ces intervalles de temps dans (C.14).

.....
Intervalles
de temps

Nous pouvons maintenant remplacer dans les termes (C.12) de la fonction de Green $g_{\mathcal{D}}$ les contributions $\mathbf{p}_i^{(n_i)}$ par leur dépendance en temps (C.9). Avec les nouvelles variables d'intégration $\Delta\tau_j$ (C.15), on a d'après (C.9)

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_i^{(n_i)}(t_{\sigma(j)}, t_{\sigma(i)}) &\propto \exp[-i|\mathbf{e}_{n_i}||t_{\sigma(j)} - t_{\sigma(i)}|] \\ &\propto \exp\left[-i|\mathbf{e}_{n_i}|\left(\sum_{\substack{\text{Intervalle } l \\ \text{entre } t_{\sigma(j)} \text{ et} \\ t_{\sigma(i)}}} \Delta\tau_l\right)\right], \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

où la somme est effectuée sur tous les intervalles de temps qui sont parcourus par le propagateur $\mathbf{p}_i^{(n_i)}$ (cf. (C.14)).

Le facteur $\exp(iEt_0)$ de (C.13) s'écrit en fonction des variables d'intervalle de temps (C.15) d'une façon similaire à (C.16), mais avec le *signe* de t_0 à prendre en compte :

$$t_0 = \pm \sum_{\substack{\text{Intervalles } l \\ \text{entre } 0 \text{ et } t_0}} \Delta\tau_l, \text{ pour } t_0 \gtrless 0. \quad (\text{C.17})$$

.....
Intégration Pour réaliser l'intégration sur chaque intervalle de temps $\Delta\tau_l$ (C.15), après changement de variable dans (C.13), il suffit de grouper toutes les exponentielles de (C.13) qui contiennent $\Delta\tau_l$. D'après (C.16) et (C.17), l'exponentielle de (C.13) provenant de l'intervalle de temps $\Delta\tau_l$ est simplement

$$\exp \left[-i \left(\chi(l)E + \sum_{\substack{\text{Propagateurs } i \text{ de} \\ \text{l'intervalle } \Delta\tau_l}} |\epsilon_{n_i}| \right) \Delta\tau_l \right], \quad (\text{C.18})$$

où la fonction χ sert à prendre en compte (C.17) :

$$\chi(l) \equiv \begin{cases} -1 & \text{si } \Delta\tau_l \text{ est compris entre les temps } 0 \text{ et } t_0 > 0 \\ +1 & \text{si } \Delta\tau_l \text{ est compris entre les temps } t_0 < 0 \text{ et } 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{C.19})$$

Intégrer le facteur (C.18) de (C.13) se réalise simplement grâce à

$$\int_0^\infty dt e^{-i\varepsilon|t|} = \frac{-i}{\varepsilon - i0}, \quad (\text{C.20})$$

où nous avons introduit la quantité infinitésimale $i0$ (*cf.* section III/2.3-b) pour rendre l'intégrale convergente. Nous avons ainsi pour (C.18) :

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty d\Delta\tau_l \exp \left[-i \left(\chi(l)E + \sum_{\substack{\text{Propagateurs } i \text{ de} \\ \text{l'intervalle } \Delta\tau_l}} |\epsilon_{n_i}| \right) \Delta\tau_l \right] \\ &= \frac{-i}{\chi(l)E + \sum_{\substack{\text{Propagateurs } i \text{ de} \\ \text{l'intervalle } \Delta\tau_l}} |\epsilon_{n_i}| - i0}. \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

.....
Singularités La présence ou non d'une singularité en E dans ce facteur de (C.13) dépend de la valeur de $\chi(l)$. D'après (C.19), $\chi(j) = 0$ si et seulement si l'intervalle $\Delta\tau_l$ n'est pas compris entre 0 et t_0 : les intervalles de temps situés *en dehors* des temps 0 et t_0 attachés aux électrons externes *ne donnent aucune singularité* — c'est par exemple le cas de l'intervalle de temps $\Delta\tau_4 = t_{\sigma(4)} - t_{\sigma(3)}$, dans (C.14).

Au contraire, les intervalles de temps $\Delta\tau_l$ compris entre les instants 0 et t_0 (*cf.* (C.14)) donnent une *singularité*, située d'après (C.21) en

$$E = -\chi(l) \left[\sum_{\substack{\text{Propagateurs } i \text{ de} \\ \text{l'intervalle } \Delta\tau_l}} |\epsilon_{n_i}| - i0 \right], \quad (\text{C.22})$$

où, pour un ordonnancement temporel fixé par σ — *cf.* (C.13) —, $\chi(l)$ est constant (car uniquement déterminé d'après (C.19) par la position de t_0 par

rapport au temps 0). En d'autres termes, les propagateurs qui se trouvent dans un tel intervalle de temps $\Delta\tau_l$ créent la singularité (C.22) dans (C.13).

Si l'on prend en compte l'ensemble des facteurs exponentiels (C.18) associés aux intervalles de temps $\Delta\tau_l$ qui apparaissent dans un terme (C.13), on voit que *chaque* choix d'un ordonnancement temporel des instants d'interaction (et des instants attachés aux propagateurs externes) et *chaque* choix d'un état propre pour les propagateurs d'un diagramme donne un ensemble de pôles en $E = \mathcal{E}_{1,\dots,k''}$ (dont les valeurs sont déterminées par (C.22)) :

$$g_{\mathcal{D};n_1,n_2,\dots}^\sigma(E) \propto \left(\frac{1}{E - \mathcal{E}_1} \cdots \frac{1}{E - \mathcal{E}_{k''}} \right) \cdots, \quad (\text{C.23})$$

où les points de suspension finals représentent une fonction indépendante de E .

On obtient la structure analytique de la valeur $g_{\mathcal{D}}$ (C.6) d'un diagramme (avec ou sans particule fantôme) par simple sommation des singularités (C.23) — *cf.* (C.10) et (C.12). Notons que les sommations sur les états propres, dans (C.12), sont soit effectuées sur des états discrets (états liés de Dirac) soit sur des états variant continûment (continua de Dirac et photons) : ceci affecte la nature des singularités (C.21), puisqu'une *intégration* sur l'une des énergies ϵ_{n_i} qui contribue à une singularité crée une *coupure*. La fonction (C.6) possède par contre un *pôle* en (C.22) *si* toutes les énergies propres contenues dans l'intervalle $\Delta\tau_l$ appartiennent à une partie *discrète* du spectre (*i. e.* sont toutes des énergies d'électrons liés).

SECTION 6 (Appendice C)

Conclusion

Nous avons prouvé dans cet appendice l'ensemble des résultats mathématiques qui servent de fondement à la méthode de la particule fantôme que j'ai introduite dans la section IV/3, où ils sont mis en pratique — voir aussi le chapitre V. Mes calculs généralisent ceux de SHABAEV [2000] ou de SHABAEV [2002] à l'étude des singularités de l'expression mathématique de tout diagramme *contenant des propagateurs fantômes*. Les résultats obtenus ici sont d'une grande utilité pratique, puisqu'ils permettent de lire graphiquement les singularités créées par un diagramme (*cf.* section IV/3.3-b), ce qui ouvre la porte à des calculs systématiques du hamiltonien effectif (III.39a) de la méthode de la fonction de Green à deux temps.

C/6. Conclusion

APPENDICE D

Self énergie : résultats numériques

SECTION 1 (Appendice D)

Présentation des résultats

Self énergie
réduite

Cet appendice contient des valeurs numériques de la contribution de la self énergie (*cf.* chapitre VI) pour 21 niveaux atomiques (n, κ) et pour 22 numéros atomiques Z du noyau, pour $10 \leq Z \leq 110$ (*cf.* section VI/3.1). Les déplacements en énergie \mathcal{E}_{SE} (VI.2) des niveaux sont exprimés dans cet appendice grâce à la fonction F définie dans la section VI/3.1-c :

$$\mathcal{E}_{\text{SE}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F(Z\alpha) m_e c^2. \quad (\text{D.1})$$

On définit de même des mises à l'échelle F_{L} et F_{H} pour les contributions dues aux particules virtuelles de basse (VI.4) et de haute énergie (VI.5) :

$$\mathcal{E}_{\text{L}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F_{\text{L}}(Z\alpha) m_e c^2 \quad \mathcal{E}_{\text{H}} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F_{\text{H}}(Z\alpha) m_e c^2, \quad (\text{D.2})$$

qui sont calculées numériquement de façon séparée et permettent d'obtenir immédiatement $F = F_{\text{L}} + F_{\text{H}}$. La section D/2 contient l'ensemble des évaluations numériques de la self énergie (D.1) et des parties basse et haute énergie F_{L} et F_{H} . Nous avons représenté graphiquement dans la section VI/3.1 toutes les valeurs de la self énergie F (D.1) présentées dans cet appendice.

Incertitudes

Comme mentionné dans la section VI/3.1, les déplacements dus à la self énergie (VI.2) sont calculés numériquement grâce à des intégrations et à une série calculées par ordinateur. Les incertitudes mentionnées dans les

résultats des sections D/2 et D/3 sont obtenues en calculant numériquement les intégrales avec un nombre croissant de points (méthode de Gauss), puis en extrayant l'écart entre les deux dernières évaluations obtenues [INDELICATO and MOHR 1998b, p. 175] ; cette méthode se fonde sur le fait que pour une fonction « lisse »¹, les résultats d'intégration obtenus par la méthode de Gauss convergent en théorie vers la bonne valeur, pour un nombre de points d'intégration croissant (et tendant vers l'infini).

Conformément à l'usage, nous avons indiqué l'incertitude sur les derniers chiffres entre parenthèses : par exemple, 1,234(5) signifie que la valeur exacte est très probablement entre les bornes $1,234 \pm 0,005$.

.....
 Comparaisons
 aux
 résultats
 perturbatifs

Afin de vérifier la cohérence des calculs non perturbatifs (en l'interaction électron-noyau) que j'ai effectués, je les ai comparés aux résultats perturbatifs disponibles actuellement pour la self énergie [ERICKSON and YENNIE 1965 ; DRAKE and SWAINSON 1990 ; MOHR and TAYLOR 2000]. Celle-ci s'écrit en effet — *cf.* (VI.8) —

$$\begin{aligned}
 F(Z\alpha) = & A_{41} \ln [(Z\alpha)^{-2}] + A_{40} + A_{50} \times (Z\alpha) \\
 & + A_{62} \times (Z\alpha)^2 \ln^2 [(Z\alpha)^{-2}] + A_{61} \times (Z\alpha)^2 \ln [(Z\alpha)^{-2}] \quad (D.3) \\
 & + A_{60} \times (Z\alpha)^2 + \dots ,
 \end{aligned}$$

où tous les coefficients mentionnés ici sont connus sous forme analytique, à l'exception de A_{40} et de A_{60} [ERICKSON and YENNIE 1965 ; DRAKE and SWAINSON 1990 ; MOHR and TAYLOR 2000]. Le coefficient A_{40} est connu pour de nombreux niveaux (y compris ceux étudiés ici), grâce à des calculs numériques de « logarithmes de Bethe » [DRAKE and SWAINSON 1990]. Au contraire, le coefficient du dernier ordre explicité dans (D.3), A_{60} , n'est connu que pour quelques états, de nombres quantiques principal et de moment cinétique assez bas : A_{60} est connu pour des niveaux s [PACHUCKI 1992, 1993] et des niveaux p [JENTSCHURA and PACHUCKI 1996 ; JENTSCHURA *et al.* 1997].

La section D/2 contient des comparaisons graphiques entre les self énergies non perturbatives rapportées ici et les termes connus du développement (D.3). Les self énergies approximatives contenues dans les graphes de la section D/2 utilisent les coefficients publiés dans les références que nous venons de citer, ainsi que de très récentes valeurs de A_{60} (non encore confirmées) pour les niveaux de grand moment cinétique étudiés dans cet appendice. Ces nouvelles valeurs de A_{60} ont été obtenues par U. Jentschura et sont reproduites dans la table D.1. Il est utile de comparer les valeurs de la self énergie que nous avons obtenues par nos méthodes numériques et non perturbatives (en $Z\alpha$) à celles données par une approximation d'ordre fini au développement (D.3) : cela permet de vérifier la cohérence des deux

¹Des détails peuvent par exemple être trouvés dans PRESS *et al.* [1993].

TAB. D.1 – *Évaluations (pas encore confirmées) par U. Jentschura du coefficient A_{60} de la self énergie (D.3).* Les graphes des self énergies perturbatives présentés avec les résultats finals dans la section D/2 utilisent les valeurs ci-dessous (données pour différents nombres quantiques principaux n).

	n	A_{60}		n	A_{60}
$p_{1/2}$	2	-0,998943738(1)	$d_{5/2}$	3	0,027612829(1)
	3	-1,148342630(1)		4	0,031134390(1)
	4	-1,196047351(1)		5	0,033105868(1)
	5	-1,224086049(1)		$f_{5/2}$	4
$p_{3/2}$	2	-0,503412800(1)	5		0,002402973(1)
	3	-0,598728745(1)	$f_{7/2}$	4	0,007247992(1)
	4	-0,631305017(1)		5	0,008086873(1)
	5	-0,653880408(1)	$g_{7/2}$	5	0,000814415(1)
$d_{3/2}$	3	0,005551882(1)	$g_{9/2}$	5	0,003079595(1)
	4	0,005587558(1)			
	5	0,006190334(1)			

approches. Les graphes de la section D/2 confirment la validité globale¹ de nos résultats.

Moyens informatiques

Les calculs numériques présentés dans cet appendice demandent de gros moyens informatiques pour pouvoir être effectués en temps raisonnable : la partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie demande en particulier l'usage d'ordinateurs massivement parallèles. Nous avons bénéficié de temps sur les machines parallèles du Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur (CINES) à Montpellier. Les résultats présentés dans cet appendice ont demandé environ 20 000 heures-processeur de calcul (soit un peu plus de deux ans) sur IBM SP.

Deux méthodes de renormalisation

Pour obtenir nos valeurs de la self énergie, nous avons utilisé la technique² développée dans INDELICATO and MOHR [1992], INDELICATO and MOHR [1998b] et INDELICATO and MOHR [2001], dont nous employons momentanément les notations.

La partie basse énergie F_L se calcule en un temps de l'ordre de l'heure sur une machine mono-processeur actuelle. La partie haute énergie se scinde en une partie connue analytiquement (ou évaluable numériquement de façon

¹Nous rappelons cependant que nous estimons que seuls nos résultats numériques de self énergies pour des noyaux suffisamment chargés ($Z \geq 60$) ont été évalués avec un intervalle de confiance correct ; la plupart des autres résultats numériques présentés ici ne demandent cependant qu'à être confirmés, et seuls certains doivent être revus, comme par exemple ceux pour $n = 7$ — cf. section VI/3.1-c.

²Nous avons aussi utilisé le code Fortran développé, pour l'illustrer, par Paul Indelicato et Peter J. Mohr.

quasi-instantanée) F_{HA} et en une partie F_{HB} qui demande un temps de l'ordre de 100 heures-processeur — et donc l'usage de machines et de code parallèles.

Comme expliqué dans INDELICATO and MOHR [1998b], il est utile de calculer la partie haute énergie F_{H} de deux façons *différentes*, qui permettent d'obtenir une indication de la validité des résultats obtenus. La première méthode consiste à calculer *analytiquement* la contribution d'un certain terme ($K^{(0,2)}$, avec la notation de INDELICATO and MOHR [1998b]) et la seconde à la calculer *numériquement*. Les tables D.23–D.43 (section D/3) contiennent ainsi deux évaluations de la partie haute énergie : l'une avec la première méthode ($F_{\text{HA}}^1 + F_{\text{HB}}^1$), l'autre avec la seconde ($F_{\text{HA}}^2 + F_{\text{HB}}^2$).

Nous avons retenu comme évaluation numérique de la partie haute énergie F_{H} le résultat le plus précis des deux méthodes (qui donneraient le même résultat si les calculs n'étaient pas effectués en précision finie). Nous avons indiqué la méthode retenue dans les tables de la section D/2. On remarque que la méthode qui calcule *numériquement* la contribution du terme $K^{(0,2)}$ (méthode « 2 ») est souvent la plus précise : ce terme permet d'éviter des compensations numériques, néfastes aux calculs en précision finie [INDELICATO and MOHR 1998b].

Self énergies numériques par niveau atomique

Cette section contient l'ensemble de nos résultats numériques du déplacement en énergie dû à la self énergie (VI.2). Nous les exprimons à l'aide de la fonctions F (D.1). Nous donnons les deux parties F_L (partie basse énergie) et F_H (partie haute énergie) qui composent le résultat final F — cf. (D.2).

Les résultats présentés dans cette section convrent les niveaux suivants :

- $3d_{5/2}$: dans la table D.2, p. 296
- $4d_{5/2}$: dans la table D.3, p. 297
- $4f_{5/2}$: dans la table D.4, p. 298
- $4f_{7/2}$: dans la table D.5, p. 299
- $5d_{5/2}$: dans la table D.6, p. 300
- $5f_{5/2}$: dans la table D.7, p. 301
- $5f_{7/2}$: dans la table D.8, p. 302
- $5g_{7/2}$: dans la table D.9, p. 303
- $5g_{9/2}$: dans la table D.10, p. 304
- $6s_{1/2}$: dans la table D.11, p. 305
- $6p_{1/2}$: dans la table D.12, p. 306
- $6p_{3/2}$: dans la table D.13, p. 307
- $6d_{3/2}$: dans la table D.14, p. 308
- $6d_{5/2}$: dans la table D.15, p. 309
- $6f_{5/2}$: dans la table D.16, p. 310
- $7s_{1/2}$: dans la table D.17, p. 311
- $7p_{1/2}$: dans la table D.18, p. 312
- $7p_{3/2}$: dans la table D.19, p. 313
- $7d_{3/2}$: dans la table D.20, p. 314
- $7d_{5/2}$: dans la table D.21, p. 315
- $7f_{5/2}$: dans la table D.22, p. 316

pour différents numéros atomiques Z du noyau (compris entre 10 et 110).

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.2 – Self énergie du niveau $3d_{5/2}$ ($n = 3$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,040722(3)	0,40527904(8)	-0,364557(2)	2
18	0,0415065(7)	0,406272733(7)	-0,3647662(7)	2
20	0,0417488(5)	0,4065909297(5)	-0,3648421(5)	2
24	0,0422912(7)	0,407307731(2)	-0,3650165(7)	2
26	0,0425891(2)	0,4077057816(3)	-0,3651167(2)	2
30	0,0432397(3)	0,4085802793(5)	-0,3653406(3)	2
32	0,0435917(5)	0,4090565069(2)	-0,3654648(5)	2
36	0,0443483(5)	0,41008662566(3)	-0,3657383(5)	2
40	0,0451751(4)	0,41122019024(6)	-0,3660451(4)	2
44	0,0460716(3)	0,41245729101(3)	-0,3663857(3)	2
50	0,0475467(3)	0,414507586101(5)	-0,3669609(3)	1
54	0,0486158(4)	0,416004590022(4)	-0,3673888(4)	2
60	0,0503484(5)	0,418445730279(9)	-0,3680973(5)	2
66	0,0522327(4)	0,421121503788(3)	-0,3688888(4)	2
70	0,0535711(5)	0,423035169543(2)	-0,3694640(5)	2
74	0,0549734(4)	0,4250519127844(7)	-0,3700786(4)	2
80	0,0571916(5)	0,4282679645073(7)	-0,3710763(5)	2
83	0,0583498(4)	0,429960595126(2)	-0,3716107(4)	1
90	0,0611703(5)	0,434123863474(2)	-0,3729536(5)	2
92	0,0620040(5)	0,4353670414067(9)	-0,3733630(5)	2
100	0,0654457(5)	0,4405686215717(8)	-0,3751229(5)	2
110	0,0699331(6)	0,44755701494(6)	-0,3776239(6)	2

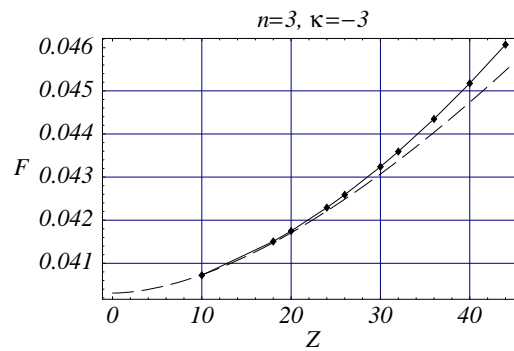


FIG. D.1 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $3d_{5/2}$ ($n = 3$, $\kappa = -3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.2 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.3 – Self énergie du niveau $4d_{5/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,042771(4)	0,4296322(2)	-0,386861(4)	2
18	0,0436789(7)	0,43087467(3)	-0,3871958(7)	2
20	0,043957(2)	0,431275984(8)	-0,387319(2)	2
24	0,0445796(6)	0,432184562(6)	-0,3876050(6)	2
26	0,0449232(4)	0,432691465(4)	-0,3877683(4)	2
30	0,0456751(5)	0,4338101259(4)	-0,3881350(5)	2
32	0,0460834(4)	0,4344219010(8)	-0,3883385(4)	2
36	0,0469641(6)	0,4357506806(4)	-0,3887866(6)	2
40	0,0479316(5)	0,4372205462(8)	-0,3892890(5)	2
44	0,0489858(4)	0,4388326797(3)	-0,3898468(4)	2
50	0,0507314(4)	0,4415205579(2)	-0,3907892(4)	2
54	0,0520055(4)	0,44349422944(7)	-0,3914887(4)	2
60	0,0540821(4)	0,44673041425(10)	-0,3926483(4)	2
66	0,0563571(4)	0,45030021749(5)	-0,3939431(4)	2
70	0,0579826(4)	0,452866372921(8)	-0,3948837(4)	2
74	0,0596935(4)	0,455581682564(9)	-0,3958881(4)	2
80	0,0624150(5)	0,4599333571(2)	-0,3975184(5)	2
83	0,0638430(4)	0,46223374410(9)	-0,3983908(4)	2
90	0,0673377(4)	0,46791953552(6)	-0,4005819(4)	1
92	0,0683750(5)	0,46962462955(6)	-0,4012496(5)	1
100	0,0726763(5)	0,47679300272(6)	-0,4041167(5)	2
110	0,0783217(5)	0,486503929(7)	-0,4081822(5)	2

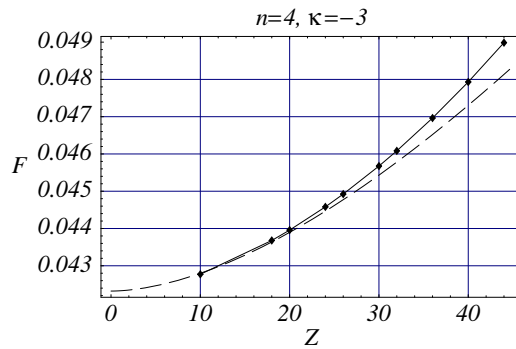


FIG. D.2 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $4d_{5/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.3 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.4 – *Self énergie du niveau $4f_{5/2}$ ($n = 4, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).*

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,021474(2)	0,3311205(3)	-0,352595(2)	2
18	-0,021348(2)	0,33162293(5)	-0,352971(2)	2
20	-0,0213175(5)	0,33179028(2)	-0,3531078(5)	2
24	-0,0212510(2)	0,332174668(8)	-0,3534257(2)	2
26	-0,0212155(8)	0,332391671(5)	-0,3536072(8)	2
30	-0,021139(2)	0,3328753328(6)	-0,354014(2)	2
32	-0,0210988(5)	0,333142054(2)	-0,3542409(5)	2
36	-0,0210124(4)	0,3337255365(5)	-0,3547379(4)	2
40	-0,0209196(2)	0,334376227(2)	-0,3552958(2)	2
44	-0,0208193(4)	0,3350948746(4)	-0,3559141(4)	2
50	-0,0206553(4)	0,3363023343(2)	-0,3569576(4)	2
54	-0,0205362(4)	0,3371952852(2)	-0,3577315(4)	2
60	-0,0203415(3)	0,3386700172(2)	-0,3590116(3)	2
66	-0,0201262(4)	0,34031178144(8)	-0,3604380(4)	2
70	-0,0199699(4)	0,341502009071(10)	-0,3614719(4)	2
74	-0,0198020(3)	0,34277108814(2)	-0,3625731(3)	1
80	-0,0195284(4)	0,34482725584(7)	-0,3643557(4)	2
83	-0,0193804(4)	0,34592610526(3)	-0,3653065(4)	2
90	-0,0190034(4)	0,348680881446(7)	-0,3676843(4)	2
92	-0,0188870(4)	0,349518531179(3)	-0,3684055(4)	2
100	-0,0183786(4)	0,353104026793(9)	-0,3714826(4)	2
110	-0,0176375(5)	0,3581431877(5)	-0,3757806(5)	2

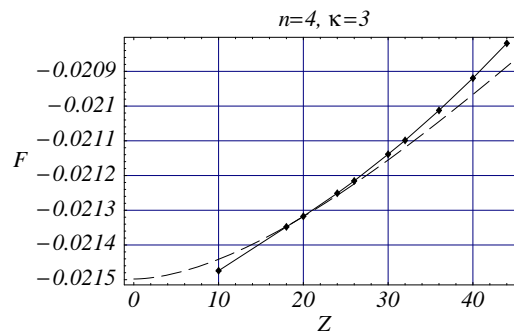


FIG. D.3 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $4f_{5/2}$ ($n = 4, \kappa = 3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.4 autour de la limite $Z = 0$.*

TAB. D.5 – Self énergie du niveau $4f_{7/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,020216(2)	0,2893424(4)	-0,2691263(8)	2
18	0,020400(2)	0,28959379(4)	-0,269194(2)	2
20	0,0204499(5)	0,28967565(2)	-0,2692258(5)	2
24	0,0205594(2)	0,289861381(8)	-0,2693019(2)	2
26	0,0206186(8)	0,289965108(6)	-0,2693465(8)	2
30	0,0207494(3)	0,2901939834(7)	-0,2694446(2)	2
32	0,0208198(4)	0,290319041(2)	-0,2694992(4)	2
36	0,0209708(3)	0,2905902347(5)	-0,2696194(3)	2
40	0,0211354(2)	0,290889402(2)	-0,2697540(2)	2
44	0,0213133(4)	0,2912164638(4)	-0,2699031(4)	2
50	0,0216052(4)	0,2917593811(2)	-0,2701541(4)	2
54	0,0218167(4)	0,29215632975(10)	-0,2703396(4)	2
60	0,0221590(3)	0,2928046338(2)	-0,2706456(3)	2
66	0,0225316(4)	0,29351702521(6)	-0,2709854(4)	2
70	0,0227973(3)	0,294027979820(4)	-0,2712307(3)	2
74	0,0230768(4)	0,29456809241(2)	-0,2714913(4)	2
80	0,0235224(4)	0,29543361998(6)	-0,2719113(4)	2
83	0,0237572(4)	0,295891597358(8)	-0,2721343(4)	2
90	0,0243367(4)	0,297026581822(9)	-0,2726898(4)	2
92	0,0245106(4)	0,297368127531(7)	-0,2728576(4)	2
100	0,0252427(4)	0,298812306220(5)	-0,2735696(4)	2
110	0,0262422(5)	0,3007964645(2)	-0,2745542(5)	2

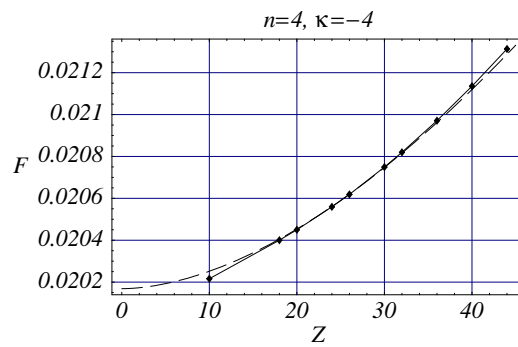


FIG. D.4 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $4f_{7/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -4$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.5 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.6 – Self énergie du niveau $5d_{5/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,04390(2)	0,4441594(5)	-0,40026(2)	2
18	0,044895(2)	0,44549872(5)	-0,4006041(10)	2
20	0,0451911(3)	0,4459324201(8)	-0,4007413(3)	2
24	0,0458505(8)	0,44691567(2)	-0,4010651(8)	2
26	0,0462147(3)	0,447464926(7)	-0,4012502(3)	2
30	0,0470133(9)	0,448678609(3)	-0,4016654(9)	2
32	0,0474468(4)	0,449343160(3)	-0,4018964(4)	2
36	0,0483841(4)	0,450788306(2)	-0,4024042(4)	2
40	0,0494150(4)	0,452389358(3)	-0,4029744(4)	2
44	0,0505407(4)	0,4541479927(9)	-0,4036073(4)	2
50	0,0524092(3)	0,4570854266(4)	-0,4046762(3)	2
54	0,0537757(4)	0,4592460544(4)	-0,4054704(4)	2
60	0,0560084(4)	0,4627947340(7)	-0,4067863(4)	2
66	0,0584608(5)	0,4667168214(6)	-0,4082561(5)	2
70	0,0602164(4)	0,4695405981(4)	-0,4093242(4)	2
74	0,0620673(3)	0,4725321398(3)	-0,4104648(3)	2
80	0,0650174(4)	0,477333656(6)	-0,4123163(4)	2
83	0,0665677(4)	0,479875122(7)	-0,4133075(4)	2
90	0,0703682(4)	0,486165636(6)	-0,4157975(4)	2
92	0,0714981(9)	0,488054363(5)	-0,4165563(9)	2
100	0,0761897(5)	0,496005078(2)	-0,4198154(5)	2
110	0,0823592(6)	0,5067986(3)	-0,4244395(4)	2

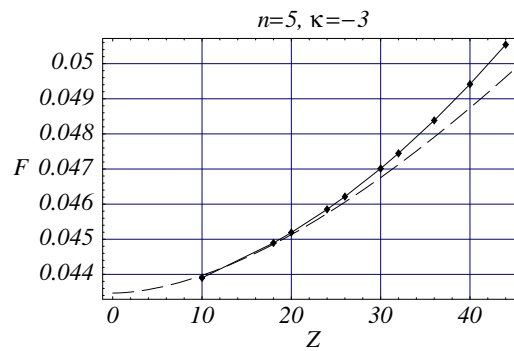


FIG. D.5 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $5d_{5/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.6 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.7 – *Self énergie du niveau $5f_{5/2}$ ($n = 5, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,02088(2)	0,3451037(5)	-0,36598(2)	2
18	-0,020710(2)	0,34565821(7)	-0,366369(2)	2
20	-0,020675(2)	0,34584313(2)	-0,366518(2)	2
24	-0,0206014(6)	0,34626803(3)	-0,3668694(6)	2
26	-0,0205624(2)	0,34650799(2)	-0,3670704(2)	2
30	-0,0204776(6)	0,347043132(4)	-0,3675208(6)	2
32	-0,0204325(4)	0,347338417(5)	-0,3677709(3)	2
36	-0,0203354(2)	0,347984827(2)	-0,3683202(2)	2
40	-0,0202308(6)	0,348706410(4)	-0,3689372(6)	2
44	-0,0201171(5)	0,349504228(2)	-0,3696213(5)	2
50	-0,0199288(3)	0,3508467598(6)	-0,3707756(3)	2
54	-0,0197908(3)	0,3518412370(6)	-0,3716320(3)	2
60	-0,0195626(3)	0,3534866433(6)	-0,3730493(3)	2
66	-0,0193062(4)	0,3553227299(5)	-0,3746290(4)	2
70	-0,0191179(4)	0,3566566193(3)	-0,3757745(4)	2
74	-0,0189139(3)	0,35808140101(5)	-0,3769953(3)	2
80	-0,0185761(3)	0,3603952301(3)	-0,3789714(3)	2
83	-0,0183914(4)	0,3616344407(6)	-0,3800259(4)	2
90	-0,0179156(3)	0,3647489475(6)	-0,3826645(3)	1
92	-0,0177669(4)	0,3656981341(5)	-0,3834650(4)	2
100	-0,0171113(4)	0,36977177834(7)	-0,3868831(4)	2
110	-0,0161389(5)	0,37552387(4)	-0,3916627(4)	2

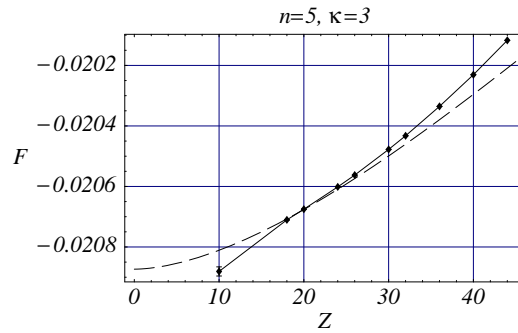


FIG. D.6 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $5f_{5/2}$ ($n = 5, \kappa = 3$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.7 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.8 – Self énergie du niveau $5f_{7/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,02081(2)	0,3033332(3)	-0,28252(2)	2
18	0,0210521(9)	0,30365384(7)	-0,2826017(9)	2
20	0,021109(2)	0,303759001(9)	-0,282650(2)	2
24	0,0212364(7)	0,30399840(3)	-0,2827620(7)	2
26	0,0213048(3)	0,30413250(2)	-0,2828277(3)	2
30	0,0214544(6)	0,304429246(3)	-0,2829749(6)	2
32	0,0215350(4)	0,304591831(4)	-0,2830569(4)	2
36	0,0217094(6)	0,304945341(2)	-0,2832360(6)	2
40	0,0218990(6)	0,305336616(4)	-0,2834376(6)	2
44	0,0221055(5)	0,305765731(2)	-0,2836603(5)	2
50	0,0224453(3)	0,3064807685(8)	-0,2840355(3)	2
54	0,0226922(4)	0,3070054441(5)	-0,2843132(4)	2
60	0,0230942(5)	0,3078653489(6)	-0,2847711(5)	2
66	0,0235345(4)	0,3088140534(5)	-0,2852795(4)	2
70	0,0238498(3)	0,3094966881(2)	-0,2856469(3)	2
74	0,0241830(3)	0,310220088785(7)	-0,2860371(3)	2
80	0,0247170(3)	0,3113828862(2)	-0,2866659(3)	2
83	0,0249997(4)	0,31199979275(5)	-0,2870001(4)	2
90	0,0257006(3)	0,3135330783(2)	-0,2878324(3)	1
92	0,0259119(3)	0,3139956372(5)	-0,2880838(3)	1
100	0,0268060(4)	0,3159568683(2)	-0,2891509(4)	2
110	0,0280366(4)	0,318664107(8)	-0,2906275(4)	2

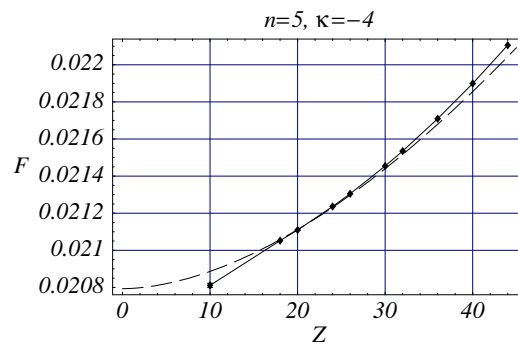


FIG. D.7 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $5f_{7/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -4$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.8 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.9 – *Self énergie du niveau $5g_{7/2}$ ($n = 5, \kappa = 4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).*

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,012916(2)	0,2505624(2)	-0,263479(2)	2
18	-0,012822(2)	0,2507514(2)	-0,263574(2)	2
20	-0,012811(2)	0,250814725(2)	-0,263626(2)	2
24	-0,0127902(7)	0,25096048(4)	-0,2637507(7)	2
26	-0,0127793(5)	0,25104283(2)	-0,2638222(4)	2
30	-0,0127578(3)	0,251226445(4)	-0,2639843(3)	2
32	-0,0127462(3)	0,251327712(6)	-0,2640739(3)	2
36	-0,0127211(4)	0,251549162(3)	-0,2642703(4)	2
40	-0,0126949(2)	0,251795868(6)	-0,2644907(2)	2
44	-0,0126671(3)	0,252067900(2)	-0,2647350(3)	2
50	-0,0126228(3)	0,2525236846(9)	-0,2651465(3)	2
54	-0,0125911(3)	0,2528595801(7)	-0,2654507(3)	2
60	-0,0125408(4)	0,2534119479(8)	-0,2659527(4)	2
66	-0,0124866(3)	0,2540232234(6)	-0,2665098(3)	2
70	-0,0124484(4)	0,2544639017(2)	-0,2669123(4)	2
74	-0,0124084(3)	0,25493145390(5)	-0,2673398(3)	2
80	-0,0123450(4)	0,2556838925(5)	-0,2680288(4)	2
83	-0,0123115(3)	0,2560834396(3)	-0,2683949(3)	2
90	-0,0122290(3)	0,25707734460(5)	-0,2693064(3)	2
92	-0,0122043(3)	0,2573774040(2)	-0,2695817(3)	2
100	-0,0120991(3)	0,258650769925(6)	-0,2707499(3)	2
110	-0,0119529(3)	0,2604117967(6)	-0,2723647(3)	1

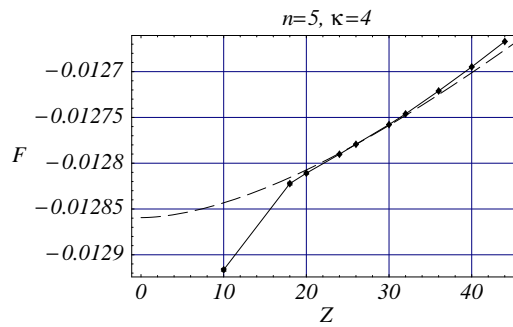


FIG. D.8 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $5g_{7/2}$ ($n = 5, \kappa = 4$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.9 autour de la limite $Z = 0$.*

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.10 – Self énergie du niveau $5g_{9/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -5$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,012094(9)	0,2255221(5)	-0,213428(8)	2
18	0,012205(2)	0,2256205(2)	-0,213415(2)	2
20	0,0122213(10)	0,22565307(2)	-0,2134318(10)	2
24	0,0122584(8)	0,22572745(4)	-0,2134690(7)	2
26	0,0122776(5)	0,22576918(3)	-0,2134916(5)	2
30	0,0123190(2)	0,225861649(4)	-0,2135427(2)	2
32	0,0123402(3)	0,225912357(6)	-0,2135721(3)	2
36	0,0123880(3)	0,226022660(3)	-0,2136346(3)	2
40	0,0124393(6)	0,226144744(6)	-0,2137055(6)	2
44	0,0124953(3)	0,226278552(3)	-0,2137833(3)	2
50	0,0125862(3)	0,2265011746(8)	-0,2139150(3)	2
54	0,0126519(3)	0,226664178(2)	-0,2140123(3)	2
60	0,0127593(2)	0,2269305793(7)	-0,2141713(2)	1
66	0,0128741(3)	0,2272233382(6)	-0,2143493(2)	1
70	0,0129555(3)	0,2274332216(2)	-0,2144777(3)	2
74	0,0130416(3)	0,22765493831(4)	-0,2146134(3)	2
80	0,0131782(3)	0,2280098498(5)	-0,2148316(3)	2
83	0,0132500(3)	0,2281974284(3)	-0,2149474(3)	2
90	0,0134266(3)	0,22866161750(6)	-0,2152350(3)	2
92	0,0134794(4)	0,22880111437(8)	-0,2153217(4)	2
100	0,0137014(3)	0,22939002750(2)	-0,2156886(3)	2
110	0,0140037(3)	0,2301968908(7)	-0,2161932(3)	1

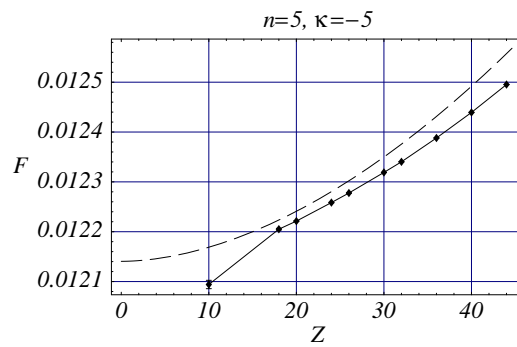


FIG. D.9 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $5g_{9/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -5$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.10 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.11 – *Self énergie du niveau $6s_{1/2}$ ($n = 6, \kappa = -1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	4,9919(2)	6,447580(8)	-1,4556(2)	2
18	3,79170(9)	5,1896668(8)	-1,39797(9)	2
20	3,59678(2)	4,9814024(5)	-1,38463(2)	2
24	3,27700(4)	4,6363846(2)	-1,35938(4)	2
26	3,14426(2)	4,49169697(9)	-1,34744(2)	2
30	2,91972(3)	4,24453988(5)	-1,32482(3)	2
32	2,82420(2)	4,138319374(2)	-1,31412(2)	2
36	2,659810(8)	3,95374421(3)	-1,293934(8)	2
40	2,52452(2)	3,79979724(2)	-1,27528(2)	2
44	2,412645(3)	3,67070209(2)	-1,258057(3)	2
50	2,280119(2)	3,514866498(5)	-1,234747(2)	1
54	2,211240(3)	3,43202453(3)	-1,220785(3)	1
60	2,1323347(4)	3,33441601(9)	-1,2020814(3)	1
66	2,0789980(7)	3,26494505(5)	-1,1859470(6)	2
70	2,0563322(6)	3,23291551(6)	-1,1765833(5)	1
74	2,0435042(9)	3,21184185(4)	-1,1683376(9)	2
80	2,042583(4)	3,200728(4)	-1,1581456(4)	2
83	2,050593(4)	3,204695(2)	-1,154102(2)	1
90	2,0932206(7)	3,2410437(4)	-1,1478231(4)	1
92	2,1122076(5)	3,2591853(2)	-1,1469777(4)	1
100	2,2253446(10)	3,3746359(4)	-1,1492913(6)	1
110	2,48747(4)	3,66094(4)	-1,1734650(4)	1

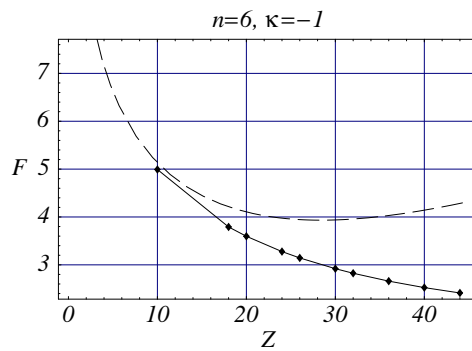


FIG. D.10 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6s_{1/2}$ ($n = 6, \kappa = -1$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.11 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.12 – *Self énergie du niveau $6p_{1/2}$ ($n = 6, \kappa = 1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).*

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,09133(9)	1,0685373(3)	-1,15987(9)	2
18	-0,069386(4)	1,10019958(4)	-1,169585(4)	2
20	-0,063051(8)	1,10982622(10)	-1,172877(8)	2
24	-0,049517(4)	1,13097532(3)	-1,180493(4)	2
26	-0,042363(3)	1,14247691(2)	-1,184840(3)	2
30	-0,0273115(8)	1,1673127707(5)	-1,1946243(8)	2
32	-0,019426(2)	1,18064920(2)	-1,200075(2)	2
36	-0,0029341(10)	1,209187366(7)	-1,2121214(10)	2
40	0,0145349(4)	1,240283336(2)	-1,2257484(4)	2
44	0,0330309(8)	1,274060136(2)	-1,2410293(8)	2
50	0,0628860(10)	1,3301306573(10)	-1,2672447(10)	2
54	0,0843726(5)	1,37144647(2)	-1,2870739(4)	2
60	0,1193948(7)	1,44006793(7)	-1,3206731(6)	2
66	0,1584567(5)	1,51784702(2)	-1,3593903(4)	2
70	0,1872492(6)	1,57562973(5)	-1,3883805(5)	1
74	0,2187141(4)	1,63891655(4)	-1,4202025(3)	1
80	0,272106(3)	1,746033(2)	-1,4739266(4)	2
83	0,302233(2)	1,806067(2)	-1,5038347(4)	2
90	0,3842852(5)	1,9672592(2)	-1,5829740(4)	2
92	0,4115078(5)	2,01986110(4)	-1,6083532(5)	1
100	0,5442630(8)	2,2696215(4)	-1,7253585(5)	1
110	0,79892(2)	2,71988(2)	-1,9209556(6)	1

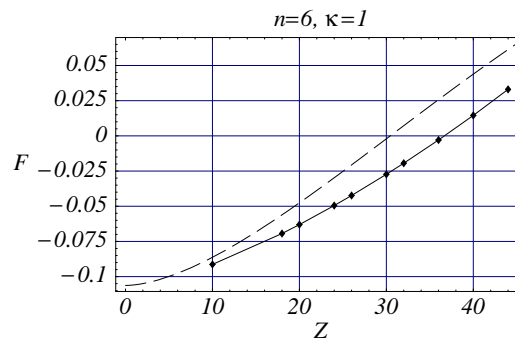


FIG. D.11 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6p_{1/2}$ ($n = 6, \kappa = 1$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.12 autour de la limite $Z = 0$.*

TAB. D.13 – *Self énergie du niveau $6p_{3/2}$ ($n = 6$, $\kappa = -2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,15209(8)	0,8083152(4)	-0,65623(8)	2
18	0,164486(5)	0,82222840(6)	-0,657743(5)	2
20	0,168070(5)	0,82631339(9)	-0,658243(5)	2
24	0,175718(4)	0,83509239(2)	-0,659375(4)	2
26	0,179748(2)	0,83976388(3)	-0,660016(2)	2
30	0,1881819(7)	0,849627370(4)	-0,6614455(7)	2
32	0,1925698(5)	0,854806315(9)	-0,6622365(5)	2
36	0,2016638(8)	0,865634247(3)	-0,6639705(8)	2
40	0,2111554(3)	0,877066820(4)	-0,6659114(3)	2
44	0,2210206(7)	0,889087824(3)	-0,6680672(7)	2
50	0,2364883(5)	0,9082111704(9)	-0,6717228(5)	2
54	0,2472373(5)	0,921693838(2)	-0,6744565(5)	2
60	0,2640149(4)	0,943051116(8)	-0,6790363(4)	2
66	0,2815933(4)	0,96583428(2)	-0,6842409(3)	2
70	0,2937732(8)	0,98186447(7)	-0,6880912(7)	2
74	0,3063370(4)	0,998610734(10)	-0,6922737(4)	2
80	0,3259342(6)	1,0251683(2)	-0,6992341(5)	2
83	0,336084(2)	1,0391391(9)	-0,7030548(3)	2
90	0,360712(2)	1,0736919(9)	-0,7129800(5)	1
92	0,367994(2)	1,0840995(10)	-0,7161054(4)	1
100	0,3981785(9)	1,1283219(4)	-0,7301434(5)	1
110	0,437750(10)	1,189912(9)	-0,7521618(4)	2

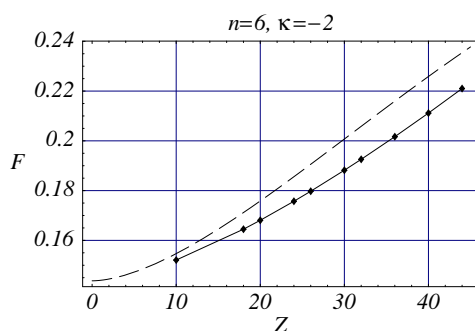


FIG. D.12 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6p_{3/2}$ ($n = 6$, $\kappa = -2$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.13 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.14 – Self énergie du niveau $6d_{3/2}$ ($n = 6, \kappa = 2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,0389(2)	0,5374785(5)	-0,5763(2)	2
18	-0,038123(9)	0,53966728(6)	-0,577790(9)	2
20	-0,037906(9)	0,54039628(8)	-0,578302(8)	2
24	-0,037426(3)	0,54207709(2)	-0,579503(3)	2
26	-0,037141(3)	0,543031008(4)	-0,580172(3)	1
30	-0,0365683(3)	0,54517240(2)	-0,5817407(3)	2
32	-0,036241(2)	0,546362960(6)	-0,582604(2)	2
36	-0,035514(2)	0,5489925735(4)	-0,584507(2)	2
40	-0,0346845(5)	0,551966828(5)	-0,5866513(5)	2
44	-0,0337379(3)	0,5553035891(3)	-0,5890415(3)	2
50	-0,0320672(3)	0,561033018(2)	-0,5931002(2)	1
54	-0,0307649(3)	0,5653691019(5)	-0,5961340(3)	1
60	-0,0284823(4)	0,572713651(3)	-0,6011959(4)	2
66	-0,0257408(4)	0,5811576900(3)	-0,6068985(4)	2
70	-0,0236192(4)	0,58745546(3)	-0,6110747(4)	2
74	-0,0212309(3)	0,59433391259(10)	-0,6155648(3)	2
80	-0,0170804(7)	0,6058389(3)	-0,6229193(4)	2
83	-0,0147175(5)	0,61217198(6)	-0,6268895(4)	2
90	-0,0083417(10)	0,6286236(6)	-0,6369653(4)	2
92	-0,0062729(8)	0,6337915(5)	-0,6400644(4)	2
100	0,0032824(6)	0,6568075(3)	-0,6535251(4)	2
110	0,018651(4)	0,691680(4)	-0,6730295(4)	2

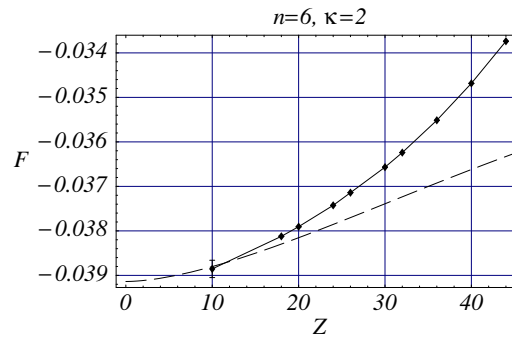


FIG. D.13 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6d_{3/2}$ ($n = 6, \kappa = 2$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.14 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.15 – *Self énergie du niveau $6d_{5/2}$ ($n = 6, \kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,04470(10)	0,45379578(8)	-0,40910(10)	2
18	0,045644(9)	0,45517607(2)	-0,409532(9)	2
20	0,045954(8)	0,45562287(8)	-0,409669(8)	2
24	0,046640(4)	0,456636429(5)	-0,409997(4)	2
26	0,0470351(2)	0,457202882(2)	-0,4101678(2)	1
30	0,0478404(8)	0,458455100(10)	-0,4106147(8)	2
32	0,0482883(7)	0,459141039(7)	-0,4108527(7)	2
36	0,0492553(2)	0,4606333450(7)	-0,4113780(2)	2
40	0,0503193(4)	0,462287588(6)	-0,4119683(4)	2
44	0,0514821(3)	0,4641056636(6)	-0,4126236(3)	2
50	0,0534153(2)	0,467144466(2)	-0,4137292(2)	1
54	0,0548294(3)	0,4693811154(2)	-0,4145517(3)	1
60	0,0571420(5)	0,473056975(3)	-0,4159150(5)	2
66	0,0596854(3)	0,477122516(5)	-0,4174372(3)	2
70	0,0615080(3)	0,48005120(2)	-0,4185432(3)	2
74	0,0634304(4)	0,483155172(2)	-0,4197247(4)	2
80	0,0664970(4)	0,48813958(4)	-0,4216425(4)	2
83	0,0681096(5)	0,4907789(2)	-0,4226693(4)	2
90	0,0720651(8)	0,4973142(4)	-0,4252491(4)	2
92	0,0732416(6)	0,4992771(2)	-0,4260355(4)	2
100	0,0781288(4)	0,50754210(4)	-0,4294133(4)	2
110	0,084558(3)	0,518766(2)	-0,4342081(4)	2

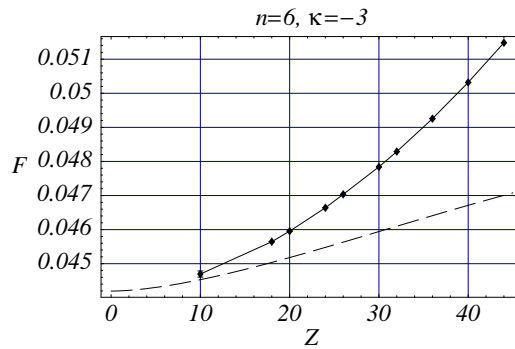


FIG. D.14 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6d_{5/2}$ ($n = 6, \kappa = -3$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.15 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.16 – *Self énergie du niveau $6f_{5/2}$ ($n = 6, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).*

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,0205(3)	0,3544008(2)	-0,3749(3)	2
18	-0,020305(3)	0,35497522(5)	-0,375280(3)	2
20	-0,02028(2)	0,3551663(2)	-0,37544(2)	2
24	-0,020191(4)	0,35560552(2)	-0,375796(4)	2
26	-0,020146(2)	0,355853624(4)	-0,376000(2)	2
30	-0,0200534(3)	0,35640699(2)	-0,3764604(3)	2
32	-0,0200053(2)	0,356712384(10)	-0,3767177(2)	2
36	-0,019900(2)	0,3573810854(7)	-0,377282(2)	2
40	-0,0197879(5)	0,358127838(8)	-0,3779157(5)	2
44	-0,0196654(3)	0,3589538597(2)	-0,3786192(3)	2
50	-0,0194609(4)	0,360344782(3)	-0,3798057(4)	2
54	-0,0193106(2)	0,361375876(2)	-0,3806864(2)	2
60	-0,0190590(5)	0,363083324(3)	-0,3821424(5)	1
66	-0,0187773(3)	0,3649907821(6)	-0,3837681(3)	2
70	-0,0185680(3)	0,366377925(7)	-0,3849459(3)	2
74	-0,0183407(3)	0,367860871(2)	-0,3862016(3)	2
80	-0,0179621(4)	0,370271920(8)	-0,3882340(4)	2
83	-0,0177542(4)	0,37156457(2)	-0,3893187(3)	2
90	-0,0172158(5)	0,37481741(4)	-0,3920332(4)	2
92	-0,0170471(4)	0,375809869(6)	-0,3928569(4)	2
100	-0,0162997(4)	0,38007470(4)	-0,3963744(4)	2
110	-0,015185(2)	0,386110(2)	-0,4012948(4)	1

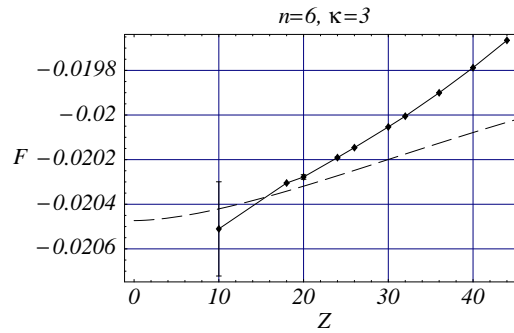


FIG. D.15 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $6f_{5/2}$ ($n = 6, \kappa = 3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.16 autour de la limite $Z = 0$.*

TAB. D.17 – *Self énergie du niveau $7s_{1/2}$ ($n = 7, \kappa = -1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	4,99556(6)	6,457427(5)	-1,46187(5)	2
18	3,79440(10)	5,1981701(6)	-1,40377(10)	2
20	3,59914(5)	4,989504(2)	-1,39036(5)	2
24	3,27880(3)	4,6436029(6)	-1,36480(3)	2
26	3,14574(2)	4,4984364(3)	-1,35270(2)	2
30	2,92053(4)	4,2502446(3)	-1,32972(4)	2
32	2,82464(3)	4,14346773(2)	-1,31883(3)	2
36	2,659483(8)	3,95769971(10)	-1,298217(8)	2
40	2,52336(2)	3,8024473(3)	-1,279092(10)	2
44	2,410578(5)	3,67192545(3)	-1,261347(5)	2
50	2,276533(8)	3,51369763(3)	-1,237165(8)	2
54	2,206517(4)	3,42907174(4)	-1,222555(4)	2
60	2,125685(3)	3,32845751(6)	-1,202772(3)	2
66	2,0701000(9)	3,2555130(2)	-1,1854130(8)	2
70	2,045714(3)	3,2208568(4)	-1,175143(3)	2
74	2,030953(2)	3,196863(2)	-1,1659098(5)	2
80	2,026635(3)	3,180706(3)	-1,1540709(6)	1
83	2,032676(2)	3,181791(2)	-1,1491153(8)	1
90	2,06979(2)	3,21024(2)	-1,1404435(3)	1
92	2,08691(2)	3,22575(2)	-1,1388342(3)	1
100	2,19079(4)	3,32842(4)	-1,1376293(4)	1
110	2,43487(7)	3,59069(7)	-1,155827(2)	1

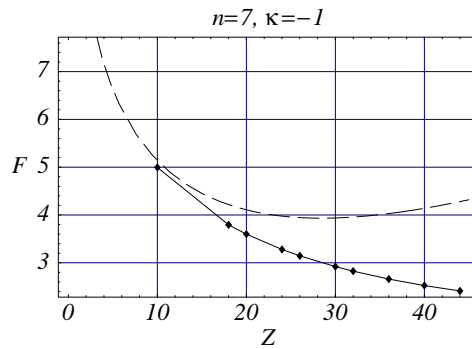


FIG. D.16 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7s_{1/2}$ ($n = 7, \kappa = -1$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.17 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.18 – Self énergie du niveau $7p_{1/2}$ ($n = 7, \kappa = 1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l'aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d'une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d'une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l'évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,0902(2)	1,0759738(2)	-1,1661(2)	2
18	-0,06809(10)	1,1074598(3)	-1,17555(10)	2
20	-0,06167(5)	1,11701487(9)	-1,17868(5)	2
24	-0,04801(2)	1,13798097(5)	-1,18599(2)	2
26	-0,04080(2)	1,149369825(5)	-1,19017(2)	2
30	-0,02566(2)	1,17393268(6)	-1,19959(2)	2
32	-0,017727(10)	1,18710679(3)	-1,204834(10)	2
36	-0,001152(5)	1,21526318(3)	-1,216415(5)	2
40	0,016387(2)	1,2458926(2)	-1,229506(2)	2
44	0,0349351(5)	1,27910652(3)	-1,2441714(5)	2
50	0,0648270(7)	1,33412242(3)	-1,2692954(7)	2
54	0,0863015(5)	1,374571154(5)	-1,2882697(5)	2
60	0,1212315(4)	1,44159580(10)	-1,3203643(3)	2
66	0,1600837(6)	1,5173457(3)	-1,3572620(4)	2
70	0,1886503(9)	1,5734814(4)	-1,3848310(6)	2
74	0,219798(2)	1,6348378(10)	-1,4150400(5)	1
80	0,272506(4)	1,738409(4)	-1,4659037(5)	2
83	0,302161(5)	1,796313(5)	-1,4941519(3)	2
90	0,38267(2)	1,95134(2)	-1,5686713(3)	2
92	0,40930(2)	2,00181(2)	-1,5925019(4)	2
100	0,538702(2)	2,240677(2)	-1,7019748(6)	2
110	0,78523(2)	2,66895(2)	-1,883717(2)	1

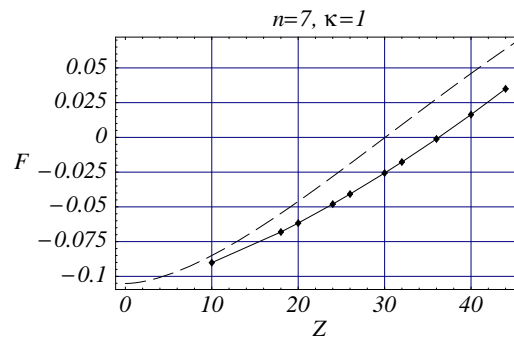


FIG. D.17 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7p_{1/2}$ ($n = 7, \kappa = 1$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.18 autour de la limite $Z = 0$.

TAB. D.19 – *Self énergie du niveau $7p_{3/2}$ ($n = 7$, $\kappa = -2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,15319(9)	0,8158107(7)	-0,66262(9)	2
18	0,16568(3)	0,8297328(4)	-0,66405(3)	2
20	0,16924(5)	0,8338179(2)	-0,66458(5)	2
24	0,17695(2)	0,84259219(5)	-0,66564(2)	2
26	0,18101(2)	0,84725920(5)	-0,66625(2)	2
30	0,18947(2)	0,85710873(7)	-0,66763(2)	2
32	0,193881(8)	0,862278001(7)	-0,668397(8)	2
36	0,203008(5)	0,87308112(4)	-0,670073(5)	2
40	0,212530(2)	0,8844811(3)	-0,671951(2)	2
44	0,2224239(7)	0,89646115(4)	-0,6740372(7)	2
50	0,2379321(4)	0,91550685(4)	-0,6775747(3)	2
54	0,2487060(4)	0,92892638(2)	-0,6802204(4)	2
60	0,2655184(7)	0,95017104(6)	-0,6846526(6)	2
66	0,2831297(7)	0,9728192(2)	-0,6896895(6)	2
70	0,2953300(8)	0,98874642(8)	-0,6934164(7)	2
74	0,3079138(7)	1,0053788(2)	-0,6974650(5)	2
80	0,327538(4)	1,031745(3)	-0,7042069(3)	1
83	0,337704(5)	1,045610(5)	-0,7079055(4)	2
90	0,362365(7)	1,079888(6)	-0,7175227(6)	2
92	0,369657(7)	1,090209(6)	-0,7205527(7)	2
100	0,399876(7)	1,134048(6)	-0,7341715(5)	2
110	0,43948(3)	1,19505(3)	-0,7555685(4)	2

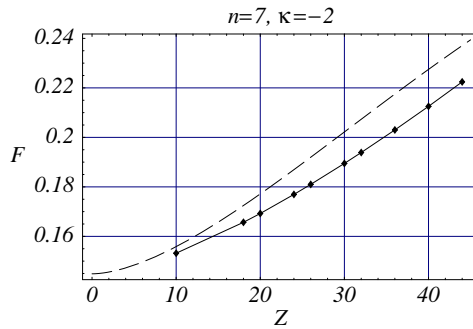


FIG. D.18 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7p_{3/2}$ ($n = 7$, $\kappa = -2$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.19 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.20 – *Self énergie du niveau $7d_{3/2}$ ($n = 7, \kappa = 2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).*

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,03829(4)	0,5443157(7)	-0,58261(4)	2
18	-0,03768(9)	0,5464817(2)	-0,58416(9)	2
20	-0,03743(4)	0,547203166(2)	-0,58463(4)	2
24	-0,03691(3)	0,54886647(5)	-0,58578(3)	2
26	-0,03663(2)	0,54981052(5)	-0,58644(2)	2
30	-0,036012(8)	0,551930141(6)	-0,587942(8)	2
32	-0,035671(5)	0,553108825(3)	-0,588780(5)	2
36	-0,034922(5)	0,555712907(9)	-0,590635(5)	2
40	-0,034061(2)	0,5586594(2)	-0,592720(2)	2
44	-0,0330804(4)	0,56196662(4)	-0,5950470(4)	2
50	-0,0313525(3)	0,56764883(2)	-0,5990013(3)	2
54	-0,0300038(4)	0,571952040(10)	-0,6019559(4)	2
60	-0,0276377(4)	0,57924612(9)	-0,6068838(4)	2
66	-0,0247956(4)	0,58763961(2)	-0,6124352(4)	2
70	-0,0225952(3)	0,59390443(2)	-0,6164996(3)	2
74	-0,0201176(5)	0,6007511(2)	-0,6208687(3)	2
80	-0,015811(2)	0,612212(2)	-0,6280229(5)	2
83	-0,013358(2)	0,618526(2)	-0,6318840(4)	2
90	-0,006740(4)	0,634940(3)	-0,6416802(3)	2
92	-0,004593(4)	0,640100(3)	-0,6446926(3)	2
100	0,005326(5)	0,663098(4)	-0,6577724(4)	2
110	0,02127(3)	0,69799(3)	-0,6767158(4)	1

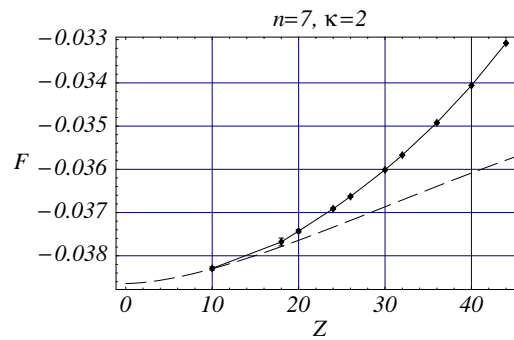


FIG. D.19 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7d_{3/2}$ ($n = 7, \kappa = 2$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.20 autour de la limite $Z = 0$.*

TAB. D.21 – *Self énergie du niveau $7d_{5/2}$ ($n = 7, \kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — *cf.* (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (*cf.* section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	0,04516(5)	0,4606496(2)	-0,41549(5)	2
18	0,04608(10)	0,4620447(2)	-0,41597(10)	2
20	0,04643(4)	0,46249648(4)	-0,41607(4)	2
24	0,04715(2)	0,46352134(3)	-0,41637(2)	2
26	0,04754(2)	0,46409416(5)	-0,41655(2)	2
30	0,048386(9)	0,46536067(2)	-0,416975(8)	2
32	0,048842(7)	0,466054538(2)	-0,417212(7)	2
36	0,049828(4)	0,46756432(2)	-0,417736(4)	2
40	0,050914(2)	0,46923828(10)	-0,418324(2)	2
44	0,0520997(4)	0,47107842(2)	-0,4189787(4)	2
50	0,0540680(6)	0,474154909(8)	-0,4200869(5)	2
54	0,0555091(7)	0,476419867(7)	-0,4209108(7)	2
60	0,0578679(3)	0,48014312(6)	-0,4222753(3)	2
66	0,0604622(4)	0,48426214(3)	-0,4238000(4)	2
70	0,0623220(6)	0,48722987(5)	-0,4249079(5)	2
74	0,0642846(4)	0,49037557(4)	-0,4260910(4)	2
80	0,0674153(9)	0,4954276(5)	-0,4280123(4)	2
83	0,069062(2)	0,498103(2)	-0,4290408(4)	2
90	0,073102(2)	0,504728(2)	-0,4316256(4)	2
92	0,074304(3)	0,506717(2)	-0,4324133(4)	2
100	0,079296(4)	0,515094(3)	-0,4357983(4)	2
110	0,085863(2)	0,5264675(10)	-0,4406047(4)	1

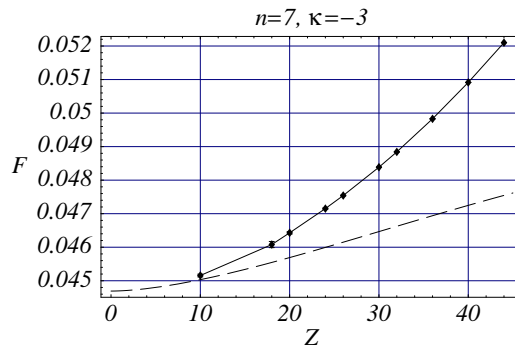


FIG. D.20 – *Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7d_{5/2}$ ($n = 7, \kappa = -3$).* Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, *cf.* section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.21 autour de la limite $Z = 0$.

D/2. Self énergies numériques par niveau atomique

TAB. D.22 – Self énergie du niveau $7f_{5/2}$ ($n = 7, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. La self énergie est exprimée à l’aide de la fonction standard F (VI.7), qui est la somme d’une partie F_L due aux particules virtuelles de basse énergie et d’une partie F_H due aux particules virtuelles de haute énergie — cf. (D.2). La méthode retenue pour l’évaluation de la partie haute énergie est indiquée dans la dernière colonne (cf. section D/1).

Z	F	F_L	F_H	Méth. F_H
10	-0,02017(3)	0,3610289(2)	-0,38119(3)	2
18	-0,02013(9)	0,3616075(3)	-0,38173(9)	2
20	-0,02004(4)	0,36180011(5)	-0,38184(4)	2
24	-0,01992(2)	0,36224263(4)	-0,38217(2)	2
26	-0,01988(2)	0,36249260(6)	-0,38237(2)	2
30	-0,019817(6)	0,36305014(2)	-0,382867(6)	1
32	-0,019718(9)	0,363357863(2)	-0,383076(9)	2
36	-0,019604(3)	0,36403172(2)	-0,383635(3)	2
40	-0,019483(2)	0,36478433(5)	-0,384268(2)	2
44	-0,0193533(4)	0,36561701(2)	-0,3849703(4)	2
50	-0,0191372(7)	0,367019609(6)	-0,3861568(7)	2
54	-0,0189782(3)	0,368059766(3)	-0,3870380(3)	2
60	-0,0187122(4)	0,36978302(4)	-0,3884952(3)	2
66	-0,0184107(4)	0,37170936(3)	-0,3901200(4)	2
70	-0,0181873(4)	0,37311104(3)	-0,3912983(3)	2
74	-0,0179439(3)	0,37461027(2)	-0,3925542(3)	2
80	-0,0175374(5)	0,3770494(2)	-0,3945869(3)	2
83	-0,0173140(3)	0,37835793(3)	-0,3956719(3)	2
90	-0,0167338(5)	0,3816531(2)	-0,3983869(3)	2
92	-0,0165516(5)	0,3826592(2)	-0,3992109(3)	2
100	-0,015744(2)	0,386985(2)	-0,4027288(3)	1
110	-0,014534(4)	0,393116(4)	-0,4076499(4)	2

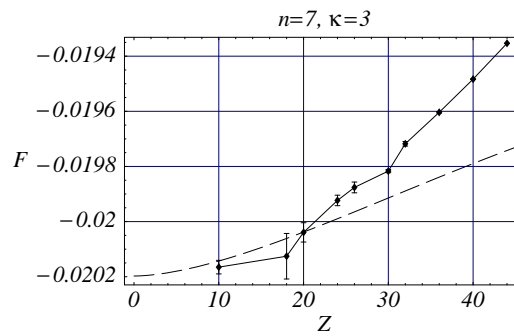


FIG. D.21 – Comparaison entre évaluations perturbatives et non perturbatives de la self énergie du niveau $7f_{5/2}$ ($n = 7, \kappa = 3$). Nous avons représenté en pointillés le développement perturbatif (tronqué, cf. section D/1) et en traits pleins les valeurs numériques de la table D.22 autour de la limite $Z = 0$.

Contributions numériques détaillées

Cette section contient des résultats numériques détaillés pour les trois parties de la self énergie F_L (due aux photons de basse énergie) et F_{HA} et F_{HB} (dues aux photons de grande énergie) — *cf.* section D/1. Les résultats obtenus par les deux méthodes de calcul de la partie haute énergie présentées dans la section D/1 sont indiqués séparément (on doit avoir au total des contributions semblables $F_{HA}^1 + F_{HB}^1 \simeq F_{HA}^2 + F_{HB}^2$, ce qui est toujours vérifié, sauf quand l'une des méthodes donne un résultat clairement incorrect — ce qui arrive à la méthode « 1 »).

Les tables qui suivent détaillent ces cinq contributions pour les niveaux suivants :

- $3d_{5/2}$: dans la table D.23, p. 318
- $4d_{5/2}$: dans la table D.24, p. 319
- $4f_{5/2}$: dans la table D.25, p. 320
- $4f_{7/2}$: dans la table D.26, p. 321
- $5d_{5/2}$: dans la table D.27, p. 322
- $5f_{5/2}$: dans la table D.28, p. 323
- $5f_{7/2}$: dans la table D.29, p. 324
- $5g_{7/2}$: dans la table D.30, p. 325
- $5g_{9/2}$: dans la table D.31, p. 326
- $6s_{1/2}$: dans la table D.32, p. 327
- $6p_{1/2}$: dans la table D.33, p. 328
- $6p_{3/2}$: dans la table D.34, p. 329
- $6d_{3/2}$: dans la table D.35, p. 330
- $6d_{5/2}$: dans la table D.36, p. 331
- $6f_{5/2}$: dans la table D.37, p. 332
- $7s_{1/2}$: dans la table D.38, p. 333
- $7p_{1/2}$: dans la table D.39, p. 334
- $7p_{3/2}$: dans la table D.40, p. 335
- $7d_{3/2}$: dans la table D.41, p. 336
- $7d_{5/2}$: dans la table D.42, p. 337
- $7f_{5/2}$: dans la table D.43, p. 338

pour différents numéros atomiques Z du noyau (compris entre 10 et 110).

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.23 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $3d_{5/2}$ ($n = 3$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,40527904(8)	-54,6747011(3)	54,312(2)	-0,2728013(3)	-0,091756(2)
18	0,406272733(7)	-17,06076143(2)	16,69605(4)	-0,27310269(2)	-0,0916636(7)
20	0,4065909297(5)	-13,87036384(2)	13,50555(2)	-0,27320575(2)	-0,0916364(5)
24	0,407307731(2)	-9,714546520(7)	9,349540(5)	-0,273444822(7)	-0,0915717(7)
26	0,4077057816(3)	-8,317401973(4)	7,952291(4)	-0,273580860(4)	-0,0915358(2)
30	0,4085802793(5)	-6,314555766(3)	5,949217(3)	-0,273886074(3)	-0,0914545(3)
32	0,4090565069(2)	-5,582680838(3)	5,217217(2)	-0,274055318(3)	-0,0914095(5)
36	0,41008662566(3)	-4,467921392(2)	4,102184(2)	-0,274427267(2)	-0,0913111(5)
40	0,41122019024(6)	-3,6706776396(9)	3,3046331(10)	-0,2748441222(9)	-0,0912009(4)
44	0,41245729101(3)	-3,0809471852(6)	2,7145619(8)	-0,2753062667(6)	-0,0910795(3)
50	0,414507586101(5)	-2,4476650984(4)	2,0807042(3)	-0,2760853538(4)	-0,0908759(4)
54	0,416004590022(4)	-2,1377234608(3)	1,7703350(5)	-0,2766627015(3)	-0,0907261(4)
60	0,418445730279(9)	-1,7840919276(2)	1,4159946(8)	-0,2776170196(2)	-0,0904803(5)
66	0,421121503788(3)	-1,5227680750(2)	1,1538793(5)	-0,2786791277(2)	-0,0902097(4)
70	0,423035169543(2)	-1,38480292842(10)	1,0153389(6)	-0,27944820659(10)	-0,0900158(5)
74	0,4250519127844(7)	-1,26875521002(8)	0,8986765(5)	-0,28026695347(8)	-0,0898116(4)
80	0,4282679645073(7)	-1,12651481908(6)	0,7554384(5)	-0,28158996764(6)	-0,0894864(5)
83	0,429960595126(2)	-1,06681297766(5)	0,6952022(4)	-0,28229497029(5)	-0,0893157(5)
90	0,434123863474(2)	-0,95033864309(4)	0,5773849(5)	-0,28405549116(4)	-0,0888981(5)
92	0,4353670414067(9)	-0,92193678172(3)	0,5485737(5)	-0,28458877031(3)	-0,0887742(5)
100	0,4405686215717(8)	-0,82526580198(3)	0,4501429(6)	-0,28686031023(3)	-0,0882626(5)
110	0,44755701494(6)	-0,73371208408(2)	0,3560881(7)	-0,29002255717(2)	-0,0876014(6)

TAB. D.24 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $4d_{5/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,4296322(2)	-72,8600542(6)	72,483(6)	-0,2931079(6)	-0,093753(3)
18	0,43087467(3)	-22,70814952(5)	22,3213(2)	-0,29345486(5)	-0,0937410(6)
20	0,431275984(8)	-18,45429185(4)	18,06714(10)	-0,29357432(4)	-0,093744(2)
24	0,432184562(6)	-12,91321565(2)	12,52566(4)	-0,29385157(2)	-0,0937534(6)
26	0,432691465(4)	-11,050364026(10)	10,66263(3)	-0,294009365(10)	-0,0937589(4)
30	0,4338101259(4)	-8,379919942(6)	7,99180(2)	-0,294363453(6)	-0,0937716(5)
32	0,4344219010(8)	-7,404096472(6)	7,015769(10)	-0,294559818(6)	-0,0937787(4)
36	0,4357506806(4)	-5,917772119(4)	5,528992(5)	-0,294991415(4)	-0,0937952(6)
40	0,4372205462(8)	-4,854804805(3)	4,4655199(7)	-0,295475179(3)	-0,0938138(5)
44	0,4388326797(3)	-4,068524750(2)	3,678680(2)	-0,296011572(2)	-0,0938353(4)
50	0,4415205579(2)	-3,2241950254(9)	2,833406(2)	-0,2969159933(9)	-0,0938732(4)
54	0,44349422944(7)	-2,8109742962(6)	2,4194856(10)	-0,2975863516(5)	-0,0939024(4)
60	0,44673041425(10)	-2,3395238489(5)	1,946875(2)	-0,2986946530(5)	-0,0939537(4)
66	0,45030021749(5)	-1,9911580041(3)	1,5972146(7)	-0,2999284909(3)	-0,0940146(4)
70	0,452866372921(8)	-1,8072529677(3)	1,412369(2)	-0,3008221523(3)	-0,0940616(4)
74	0,455581682564(9)	-1,6525749747(2)	1,2566872(8)	-0,3017737408(2)	-0,0941144(4)
80	0,4599333571(2)	-1,4630070955(2)	1,0654887(9)	-0,3033118774(2)	-0,0942065(5)
83	0,46223374410(9)	-1,3834511934(2)	0,9850605(7)	-0,3041317468(2)	-0,0942590(4)
90	0,46791953552(6)	-1,22827057089(9)	0,8276887(4)	-0,30617981544(8)	-0,0944023(4)
92	0,46962462955(6)	-1,19043794406(7)	0,7891883(5)	-0,30680039352(7)	-0,0944495(5)
100	0,47679300272(6)	-1,06170214327(6)	0,6575856(5)	-0,30944481442(6)	-0,0946719(5)
110	0,486503929(7)	-0,93986043884(4)	0,5316783(5)	-0,31312890025(4)	-0,0950533(5)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.25 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $4f_{5/2}$ ($n = 4$, $\kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (*cf.* section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,3311205(3)	-72,8600542(6)	72,519(7)	-0,2981027(6)	-0,054492(2)
18	0,33162293(5)	-22,70814952(5)	22,3555(3)	-0,29847327(5)	-0,054498(2)
20	0,33179028(2)	-18,45429185(4)	18,1014(2)	-0,29860076(4)	-0,0545070(5)
24	0,332174668(8)	-12,91321565(2)	12,55985(4)	-0,29889667(2)	-0,0545290(2)
26	0,332391671(5)	-11,050364026(10)	10,69680(3)	-0,299065105(10)	-0,0545421(8)
30	0,3328753328(6)	-8,379919942(7)	8,025923(9)	-0,299443099(7)	-0,054571(2)
32	0,333142054(2)	-7,404096472(6)	7,049867(7)	-0,299652748(6)	-0,0545881(5)
36	0,3337255365(5)	-5,917772119(4)	5,563040(3)	-0,300113610(4)	-0,0546243(4)
40	0,334376227(2)	-4,854804805(3)	4,499512(2)	-0,300630288(3)	-0,0546655(2)
44	0,3350948746(4)	-4,068524750(2)	3,7126119(7)	-0,301203315(2)	-0,0547108(4)
50	0,3363023343(2)	-3,2241950254(9)	2,8672378(10)	-0,3021698347(9)	-0,0547878(4)
54	0,3371952852(2)	-2,8109742962(5)	2,4532430(10)	-0,3028864897(5)	-0,0548450(4)
60	0,3386700172(2)	-2,3395238489(5)	1,9805130(10)	-0,3040718374(5)	-0,0549397(3)
66	0,34031178144(8)	-1,9911580041(3)	1,6307201(8)	-0,3053921905(3)	-0,0550458(4)
70	0,341502009071(10)	-1,8072529677(3)	1,4457812(7)	-0,3063490043(3)	-0,0551229(4)
74	0,34277108814(2)	-1,6525749747(2)	1,2900019(3)	-0,3073682929(2)	-0,0552052(4)
80	0,34482725584(7)	-1,4630070955(2)	1,0986516(6)	-0,3090168537(2)	-0,0553388(4)
83	0,34592610526(3)	-1,3834511934(2)	1,0181448(6)	-0,3098960863(2)	-0,0554105(4)
90	0,348680881446(7)	-1,22827057089(8)	0,8605864(6)	-0,31209398644(8)	-0,0555903(4)
92	0,349518531179(3)	-1,19043794406(7)	0,8220325(6)	-0,31276040030(7)	-0,0556451(4)
100	0,353104026793(9)	-1,06170214327(6)	0,6902195(6)	-0,31560242450(6)	-0,0558802(4)
110	0,3581431877(5)	-0,93986043884(4)	0,5640798(6)	-0,31956802876(4)	-0,0562126(5)

TAB. D.26 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $4f_{7/2}$ ($n = 4$, $\kappa = -4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,2893424(4)	-72,7429840(7)	72,485(7)	-0,2051865(7)	-0,06393982(8)
18	0,28959379(4)	-22,59080866(6)	22,3220(3)	-0,20530970(6)	-0,063884(2)
20	0,28967565(2)	-18,33685947(5)	18,0678(2)	-0,20535364(5)	-0,0638721(4)
24	0,289861381(8)	-12,79557113(2)	12,52633(4)	-0,20545584(2)	-0,0638461(2)
26	0,289965108(6)	-10,93259877(2)	10,66329(3)	-0,20551402(2)	-0,0638325(8)
30	0,2901939834(7)	-8,261883709(9)	7,992456(10)	-0,205644542(9)	-0,0638001(2)
32	0,290319041(2)	-7,285909907(6)	7,016422(6)	-0,205716883(6)	-0,0637823(4)
36	0,2905902347(5)	-5,799254970(5)	5,529641(3)	-0,205875756(5)	-0,0637437(3)
40	0,290889402(2)	-4,735916831(3)	4,466166(2)	-0,206053615(3)	-0,0637004(2)
44	0,2912164638(4)	-3,949225250(3)	3,6793234(7)	-0,206250547(3)	-0,0636526(4)
50	0,2917593811(2)	-3,104200786(2)	2,8340471(10)	-0,206581937(2)	-0,0635722(4)
54	0,29215632975(10)	-2,6904644169(8)	2,4201250(10)	-0,2068270267(8)	-0,0635126(4)
60	0,2928046338(2)	-2,2181601579(5)	1,9475147(8)	-0,2072312320(5)	-0,0634144(3)
66	0,29351702521(6)	-1,8688418802(4)	1,5978566(8)	-0,2076797601(4)	-0,0633056(4)
70	0,294027979820(4)	-1,6842457473(3)	1,4130155(4)	-0,2080036693(3)	-0,0632271(3)
74	0,29456809241(2)	-1,5288307038(3)	1,2573396(4)	-0,2083476944(3)	-0,0631436(4)
80	0,29543361998(6)	-1,3380689462(2)	1,0661579(5)	-0,2089018632(2)	-0,0630094(4)
83	0,295891597358(8)	-1,2578754047(2)	0,9857413(5)	-0,2091962914(2)	-0,0629381(4)
90	0,297026581822(9)	-1,1010980854(2)	0,8284084(5)	-0,2099288906(2)	-0,0627609(4)
92	0,297368127531(7)	-1,06278056674(10)	0,7899231(6)	-0,21015006101(9)	-0,0627075(4)
100	0,298812306220(5)	-0,93197290761(7)	0,6584033(6)	-0,21108831749(7)	-0,0624813(4)
110	0,3007964645(2)	-0,80722964721(5)	0,5326754(6)	-0,21238423023(5)	-0,0621700(5)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.27 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $5d_{5/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,4441594(5)	-91,025433(2)	90,63(3)	-0,305289(2)	-0,094970(10)
18	0,44549872(5)	-28,33550212(10)	27,9356(4)	-0,30564596(10)	-0,0949581(9)
20	0,4459324201(8)	-23,01816430(6)	22,6178(3)	-0,30577031(6)	-0,0949710(3)
24	0,44691567(2)	-16,09178276(4)	15,69085(9)	-0,30605913(4)	-0,0950060(8)
26	0,447464926(7)	-13,76319763(2)	13,36203(6)	-0,30622358(2)	-0,0950266(3)
30	0,448678609(3)	-10,42509637(2)	10,02347(2)	-0,30659263(2)	-0,0950727(9)
32	0,449343160(3)	-9,205291460(10)	8,803422(9)	-0,306797303(10)	-0,0950991(4)
36	0,450788306(2)	-7,347329854(7)	6,944938(3)	-0,307247179(7)	-0,0951570(4)
40	0,452389358(3)	-6,018557817(4)	5,615618(8)	-0,307751447(4)	-0,0952229(4)
44	0,4541479927(9)	-5,035638078(3)	4,632033(3)	-0,308310583(3)	-0,0952967(4)
50	0,4570854266(4)	-3,980108600(2)	3,575433(4)	-0,309253363(2)	-0,0954228(3)
54	0,4592460544(4)	-3,4634958498(10)	3,058026(3)	-0,3099521602(10)	-0,0955182(4)
60	0,4627947340(7)	-2,8740394408(9)	2,467254(2)	-0,3111074916(9)	-0,0956788(4)
66	0,4667168214(6)	-2,4384228705(5)	2,030168(3)	-0,3123937024(5)	-0,0958624(5)
70	0,4695405981(4)	-2,2084264322(5)	1,799103(2)	-0,3133253066(5)	-0,0959989(4)
74	0,4725321398(3)	-2,0149565294(4)	1,604492(2)	-0,3143173061(4)	-0,0961475(3)
80	0,477333656(6)	-1,7777992397(3)	1,3654826(5)	-0,3159207800(3)	-0,0963955(4)
83	0,479875122(7)	-1,6782493341(3)	1,2649420(9)	-0,3167754846(3)	-0,0965320(4)
90	0,486165636(6)	-1,4840118383(2)	1,0682143(7)	-0,3189105978(2)	-0,0968869(4)
92	0,488054363(5)	-1,4366419345(2)	1,020087(6)	-0,3195575576(2)	-0,0969987(9)
100	0,496005078(2)	-1,2753859799(2)	0,855570(2)	-0,3223144289(2)	-0,0975009(5)
110	0,5067986(3)	-1,12261800697(7)	0,6981787(10)	-0,32615525397(7)	-0,0982842(4)

TAB. D.28 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $5f_{5/2}$ ($n = 5$, $\kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,3451037(5)	-91,025433(2)	90,6897(10)	-0,310282(2)	-0,05570(2)
18	0,34565821(7)	-28,33550212(10)	27,9703(7)	-0,31065908(10)	-0,055710(2)
20	0,34584313(2)	-23,01816430(6)	22,6523(4)	-0,31079023(6)	-0,0557281(10)
24	0,34626803(3)	-16,09178276(4)	15,7251(2)	-0,31109482(4)	-0,0557746(5)
26	0,34650799(2)	-13,76319763(2)	13,39626(7)	-0,31126825(2)	-0,0558021(2)
30	0,347043132(4)	-10,42509637(2)	10,05763(3)	-0,31165749(2)	-0,0558633(6)
32	0,347338417(5)	-9,205291460(10)	8,83756(2)	-0,311873383(10)	-0,0558976(3)
36	0,347984827(2)	-7,347329854(7)	6,97903(2)	-0,312347973(7)	-0,0559723(2)
40	0,348706410(4)	-6,018557817(4)	5,649629(9)	-0,312880028(4)	-0,0560572(6)
44	0,349504228(2)	-5,035638078(3)	4,666022(7)	-0,313470082(3)	-0,0561512(5)
50	0,3508467598(6)	-3,980108600(2)	3,609336(4)	-0,314465254(2)	-0,0563103(3)
54	0,3518412370(6)	-3,4634958498(10)	3,091866(2)	-0,3152030948(10)	-0,0564289(3)
60	0,3534866433(6)	-2,8740394408(9)	2,5009918(3)	-0,3164233728(9)	-0,0566259(3)
66	0,3553227299(5)	-2,4384228705(5)	2,0637949(10)	-0,3177824686(5)	-0,0568465(4)
70	0,3566566193(3)	-2,2084264322(5)	1,8326519(4)	-0,3187672476(5)	-0,0570072(4)
74	0,35808140101(5)	-2,0149565294(4)	1,6379609(7)	-0,3198162252(4)	-0,0571791(3)
80	0,3603952301(3)	-1,7777992397(3)	1,3988276(10)	-0,3215125789(3)	-0,0574588(3)
83	0,3616344407(6)	-1,6782493341(3)	1,2982234(6)	-0,3224171868(3)	-0,0576087(4)
90	0,3647489475(6)	-1,4840118383(2)	1,1013473(3)	-0,3246781702(2)	-0,0579862(4)
92	0,3656981341(5)	-1,4366419345(2)	1,0531768(5)	-0,3253636120(2)	-0,0581014(4)
100	0,36977177834(7)	-1,2753859799(2)	0,8885030(7)	-0,3282862619(2)	-0,0585968(4)
110	0,37552387(4)	-1,12261800697(7)	0,7309554(5)	-0,33236293988(7)	-0,0592998(4)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.29 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $5f_{7/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,3033332(3)	-90,908358(2)	90,6561(10)	-0,217370(2)	-0,06515(2)
18	0,30365384(7)	-28,2181427(2)	27,9367(7)	-0,2175036(2)	-0,0650981(8)
20	0,303759001(9)	-22,90070891(10)	22,6187(4)	-0,21755303(10)	-0,0650966(10)
24	0,30399840(3)	-15,97410492(4)	15,6916(2)	-0,21766821(4)	-0,0650938(7)
26	0,30413250(2)	-13,64539319(3)	13,36270(7)	-0,21773384(3)	-0,0650939(3)
30	0,304429246(3)	-10,30700775(2)	10,02409(3)	-0,21788113(2)	-0,0650937(6)
32	0,304591831(4)	-9,08704517(2)	8,80402(2)	-0,21796278(2)	-0,0650941(4)
36	0,304945341(2)	-7,228736786(9)	6,94552(2)	-0,218142128(9)	-0,0650938(6)
40	0,305336616(4)	-5,899575674(5)	5,616147(9)	-0,218342930(5)	-0,0650947(6)
44	0,305765731(2)	-4,916224042(5)	4,632569(6)	-0,218565283(5)	-0,0650950(5)
50	0,3064807685(8)	-3,859965175(3)	3,575933(4)	-0,218939484(3)	-0,0650960(3)
54	0,3070054441(5)	-3,342810846(2)	3,058500(2)	-0,219216260(2)	-0,0650969(3)
60	0,3078653489(6)	-2,7524572696(9)	2,467688(2)	-0,2196727660(9)	-0,0650983(5)
66	0,3088140534(5)	-2,3158393035(6)	2,0305607(10)	-0,2201793900(6)	-0,0651002(4)
70	0,3094966881(2)	-2,0851158473(6)	1,7994689(4)	-0,2205452926(6)	-0,0651016(3)
74	0,310220088785(7)	-1,8908702213(5)	1,6048335(9)	-0,2209339548(5)	-0,0651031(3)
80	0,3113828862(2)	-1,6524556206(4)	1,3657894(10)	-0,2215601036(4)	-0,0651058(3)
83	0,31199979275(5)	-1,5522337988(3)	1,2652334(10)	-0,2218928130(3)	-0,0651073(4)
90	0,3135330783(2)	-1,3563125665(3)	1,0684801(3)	-0,2227207793(3)	-0,0651115(4)
92	0,3139956372(5)	-1,3084309985(2)	1,0203472(3)	-0,2229707731(2)	-0,0651128(4)
100	0,3159568683(2)	-1,1449870230(2)	0,8558362(7)	-0,2240314710(2)	-0,0651194(4)
110	0,318664107(8)	-0,98915004822(10)	0,6985227(4)	-0,22549693851(9)	-0,0651306(4)

TAB. D.30 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $5g_{7/2}$ ($n = 5$, $\kappa = 4$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,2505624(2)	-90,908358(2)	90,69(3)	-0,220143(2)	-0,0433361(2)
18	0,2507514(2)	-28,2181427(2)	27,9560(9)	-0,2202839(2)	-0,043290(2)
20	0,250814725(2)	-22,90070891(10)	22,6378(5)	-0,22033592(10)	-0,043290(2)
24	0,25096048(4)	-15,97410492(4)	15,7106(2)	-0,22045720(4)	-0,0432935(6)
26	0,25104283(2)	-13,64539319(3)	13,38173(10)	-0,22052631(3)	-0,0432958(4)
30	0,251226445(4)	-10,30700775(2)	10,04309(5)	-0,22068141(2)	-0,0433029(2)
32	0,251327712(6)	-9,08704517(2)	8,82302(3)	-0,22076739(2)	-0,0433065(3)
36	0,251549162(3)	-7,228736786(9)	6,96449(2)	-0,220956259(9)	-0,0433140(3)
40	0,251795868(6)	-5,899575674(5)	5,635098(8)	-0,221167738(5)	-0,0433230(2)
44	0,252067900(2)	-4,916224042(5)	4,651496(4)	-0,221401939(5)	-0,0433330(3)
50	0,2525236846(9)	-3,859965175(3)	3,594822(2)	-0,221796137(3)	-0,0433504(3)
54	0,2528595801(7)	-3,342810846(2)	3,0773623(7)	-0,222087752(2)	-0,0433629(3)
60	0,2534119479(8)	-2,7524572696(9)	2,4865055(5)	-0,2225688201(9)	-0,0433839(4)
66	0,2540232234(6)	-2,3158393034(6)	2,049330(2)	-0,2231028334(6)	-0,0434070(3)
70	0,2544639017(2)	-2,0851158473(6)	1,818204(2)	-0,2234886029(6)	-0,0434237(4)
74	0,25493145390(5)	-1,8908702213(5)	1,6235305(5)	-0,2238984460(5)	-0,0434414(3)
80	0,2556838925(5)	-1,6524556206(4)	1,384427(2)	-0,2245588882(4)	-0,0434700(4)
83	0,2560834396(3)	-1,5522337988(3)	1,2838389(5)	-0,2249099053(3)	-0,0434850(3)
90	0,25707734460(5)	-1,3563125665(3)	1,0870062(5)	-0,2257836898(3)	-0,0435227(3)
92	0,2573774040(2)	-1,3084309985(2)	1,0388494(5)	-0,2260475905(2)	-0,0435341(3)
100	0,258650769925(6)	-1,1449870230(2)	0,8742372(5)	-0,2271676695(2)	-0,0435822(3)
110	0,2604117967(6)	-0,98915004822(10)	0,7167853(3)	-0,22871618244(10)	-0,0436487(3)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.31 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $5g_{9/2}$ ($n = 5$, $\kappa = -5$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,2255221(5)	-90,838149(2)	90,67(3)	-0,164422(2)	-0,049006(7)
18	0,2256205(2)	-28,1478354(2)	27,937(2)	-0,1644725(2)	-0,048943(2)
20	0,22565307(2)	-22,83036945(10)	22,6177(5)	-0,16449472(10)	-0,0489371(9)
24	0,22572745(4)	-15,90369109(5)	15,6905(2)	-0,16454701(5)	-0,0489220(7)
26	0,22576918(3)	-13,57493711(4)	13,36160(10)	-0,16457692(4)	-0,0489146(4)
30	0,225861649(4)	-10,23645695(2)	10,02298(5)	-0,16464414(2)	-0,0488986(2)
32	0,225912357(6)	-9,01644187(2)	8,80292(3)	-0,16468142(2)	-0,0488907(3)
36	0,226022660(3)	-7,158018185(10)	6,94441(2)	-0,164763288(10)	-0,0488713(3)
40	0,226144744(6)	-5,828727939(7)	5,615035(9)	-0,164854921(7)	-0,0488505(6)
44	0,226278552(3)	-4,845233253(4)	4,631457(4)	-0,164956335(4)	-0,0488269(3)
50	0,2265011746(8)	-3,788733470(3)	3,574822(2)	-0,165126853(3)	-0,0487882(3)
54	0,226664178(2)	-3,271400812(2)	3,0573907(7)	-0,165252851(2)	-0,0487594(3)
60	0,2269305793(7)	-2,680752841(2)	2,4665816(2)	-0,165460430(2)	-0,0487118(4)
66	0,2272233382(6)	-2,2438077748(7)	2,0294585(2)	-0,1656904518(7)	-0,0486592(4)
70	0,2274332216(2)	-2,0128478222(8)	1,7983704(4)	-0,1658563536(8)	-0,0486213(3)
74	0,22765493831(4)	-1,8183507577(5)	1,6037375(5)	-0,1660323655(5)	-0,0485810(3)
80	0,2280098498(5)	-1,5795305784(4)	1,3646992(10)	-0,1663154745(4)	-0,0485161(3)
83	0,2281974284(3)	-1,4790929971(4)	1,2641459(9)	-0,1664656799(4)	-0,0484818(3)
90	0,22866161750(6)	-1,2826340775(3)	1,0673994(7)	-0,1668387934(3)	-0,0483962(3)
92	0,22880111437(8)	-1,2345899496(3)	1,0192685(7)	-0,1669512595(3)	-0,0483705(4)
100	0,22939002750(2)	-1,0704551573(2)	0,8547668(4)	-0,1674274617(2)	-0,0482612(3)
110	0,2301968908(7)	-0,9136608455(2)	0,6974677(3)	-0,1680827876(2)	-0,0481106(3)

TAB. D.32 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $6s_{1/2}$ ($n = 6$, $\kappa = -1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	6,447580(8)	-110,1212131(3)	108,9(9)	-0,9889423(3)	-0,4667(2)
18	5,1896668(8)	-34,90410556(8)	33,503(5)	-0,99575097(8)	-0,40222(9)
20	4,9814024(5)	-28,52701564(5)	27,141(2)	-0,99808010(5)	-0,38655(2)
24	4,6363846(2)	-20,22406083(2)	18,8641(4)	-1,00350721(2)	-0,35587(4)
26	4,49169697(9)	-17,43476625(2)	16,0870(3)	-1,00661140(2)	-0,34083(2)
30	4,24453988(5)	-13,440430554(7)	12,11548(8)	-1,013618475(7)	-0,31120(3)
32	4,138319374(2)	-11,983070106(6)	10,66886(5)	-1,017529072(6)	-0,29659(2)
36	3,95374421(3)	-9,767830673(5)	8,47385(4)	-1,026185228(5)	-0,267749(8)
40	3,79979724(2)	-8,189746625(2)	6,91445(3)	-1,035984321(2)	-0,23929(2)
44	3,67070209(2)	-7,028986353(2)	5,77092(2)	-1,046963023(2)	-0,211094(3)
50	3,514866498(5)	-5,7952438485(7)	4,560497(2)	-1,0657202937(7)	-0,169021(7)
54	3,43202453(3)	-5,200800021(2)	3,980016(3)	-1,079794142(2)	-0,140986(5)
60	3,33441601(9)	-4,5378472010(6)	3,3357658(3)	-1,1032900438(6)	-0,098789(2)
66	3,26494505(5)	-4,0681552822(4)	2,8822076(8)	-1,1295648234(4)	-0,0563822(6)
70	3,23291551(6)	-3,8332290420(2)	2,6566458(5)	-1,1484561221(2)	-0,028127(2)
74	3,21184185(4)	-3,6475079070(2)	2,479171(3)	-1,1681684305(2)	-0,0001692(9)
80	3,200728(4)	-3,4446557338(2)	2,2865102(8)	-1,1981541478(2)	0,0400085(4)
83	3,204695(2)	-3,3725658886(2)	2,218464(2)	-1,2124679240(2)	0,058367(2)
90	3,2410437(4)	-3,27155613145(7)	2,1237330(4)	-1,23823529235(7)	0,0904125(10)
92	3,2591853(2)	-3,25921033749(6)	2,1122327(4)	-1,24142689488(6)	0,0944492(7)
100	3,3746359(4)	-3,28504062291(6)	2,1357493(6)	-1,20189682268(6)	0,052600(2)
110	3,66094(4)	-3,52390569658(2)	2,3504407(4)	-0,59429058464(2)	-0,5733(7)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.33 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $6p_{1/2}$ ($n = 6$, $\kappa = 1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	1,0685373(3)	-110,1212131(3)	108,8(4)	-1,0477571(3)	-0,11211(9)
18	1,10019958(4)	-34,90410556(8)	33,7334(7)	-1,05609784(8)	-0,113487(4)
20	1,10982622(10)	-28,52701564(5)	27,3532(7)	-1,05896076(5)	-0,113916(8)
24	1,13097532(3)	-20,22406083(2)	19,0432(2)	-1,06565225(2)	-0,114840(3)
26	1,14247691(2)	-17,43476625(2)	16,2497(2)	-1,06949293(2)	-0,115347(3)
30	1,1673127707(5)	-13,440430554(7)	12,24573(6)	-1,078199369(7)	-0,1164249(8)
32	1,18064920(2)	-11,983070106(6)	10,78294(5)	-1,083081309(6)	-0,116993(2)
36	1,209187366(7)	-9,767830673(5)	8,55568(3)	-1,093948732(5)	-0,1181727(10)
40	1,240283336(2)	-8,189746625(3)	6,963984(9)	-1,106358416(3)	-0,1193900(4)
44	1,274060136(2)	-7,028986353(2)	5,787949(4)	-1,120407721(2)	-0,1206215(8)
50	1,3301306573(10)	-5,7952438485(7)	4,527996(3)	-1,1448069908(7)	-0,1224377(10)
54	1,37144647(2)	-5,200800021(2)	3,913724(2)	-1,163485345(2)	-0,1235885(4)
60	1,44006793(7)	-4,5378472010(6)	3,217173(2)	-1,1955136961(6)	-0,1251594(6)
66	1,51784702(2)	-4,0681552822(4)	2,7087643(8)	-1,2329040812(4)	-0,1264863(4)
70	1,57562973(5)	-3,8332290420(2)	2,4448485(5)	-1,2611489085(2)	-0,1272313(6)
74	1,63891655(4)	-3,6475079070(2)	2,2273054(3)	-1,2922961052(2)	-0,1279062(6)
80	1,746033(2)	-3,4446557338(2)	1,9707291(5)	-1,3448706533(2)	-0,1290559(4)
83	1,806067(2)	-3,3725658886(2)	1,8687311(5)	-1,3738899869(2)	-0,1299447(4)
90	1,9672592(2)	-3,27155613145(7)	1,6885822(5)	-1,44816168441(7)	-0,1348123(4)
92	2,01986110(4)	-3,25921033749(6)	1,6508571(5)	-1,47062061109(6)	-0,1377329(6)
100	2,2696215(4)	-3,28504062291(6)	1,5596821(5)	-1,55566702705(6)	-0,1696945(7)
110	2,71988(2)	-3,52390569658(2)	1,6029501(6)	-1,47393747514(2)	-0,4439(4)

TAB. D.34 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $6p_{3/2}$ ($n = 6$, $\kappa = -2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,8083152(4)	-109,415213(2)	108,6(4)	-0,487740(2)	-0,16849(8)
18	0,82222840(6)	-34,1883321(2)	33,5295(7)	-0,4888790(2)	-0,168864(5)
20	0,82631339(9)	-27,80787961(7)	27,1487(7)	-0,48927033(7)	-0,168973(5)
24	0,83509239(2)	-19,49704204(4)	18,8373(2)	-0,49017936(4)	-0,169196(4)
26	0,83976388(3)	-16,70320786(3)	16,0430(2)	-0,49069743(3)	-0,169318(2)
30	0,849627370(4)	-12,69853968(2)	12,03704(3)	-0,49186183(2)	-0,1695836(7)
32	0,854806315(9)	-11,23535991(2)	10,57307(5)	-0,49250872(2)	-0,1697278(4)
36	0,865634247(3)	-9,007099321(6)	8,34310(3)	-0,493933444(6)	-0,1700370(8)
40	0,877066820(4)	-7,414030888(6)	6,748104(10)	-0,495535146(6)	-0,1703763(3)
44	0,889087824(3)	-6,236154251(3)	5,568079(4)	-0,497317038(3)	-0,1707502(7)
50	0,9082111704(9)	-4,972287337(2)	4,300561(3)	-0,500335733(2)	-0,1713871(5)
54	0,921693838(2)	-4,354424544(2)	3,679966(2)	-0,502584791(2)	-0,1718717(5)
60	0,943051116(8)	-3,6505421499(8)	2,9715049(5)	-0,5063249712(8)	-0,1727113(4)
66	0,96583428(2)	-3,1317178277(7)	2,4474764(8)	-0,5105210646(7)	-0,1737199(3)
70	0,98186447(7)	-2,8585967208(5)	2,1705053(10)	-0,5135816943(5)	-0,1745096(7)
74	0,998610734(10)	-2,6295299793(5)	1,9372562(4)	-0,5168606733(5)	-0,1754130(4)
80	1,0251683(2)	-2,3500276692(3)	1,6507934(9)	-0,5222047234(3)	-0,1770293(5)
83	1,0391391(9)	-2,2333201765(3)	1,5302651(8)	-0,5250756410(3)	-0,1779792(3)
90	1,0736919(9)	-2,0072386787(2)	1,2942587(5)	-0,5323161820(2)	-0,1806635(5)
92	1,0840995(10)	-1,9525535967(2)	1,2364482(4)	-0,5345297167(2)	-0,1815754(6)
100	1,1283219(4)	-1,7684421223(2)	1,0382987(5)	-0,5440657705(2)	-0,1860775(5)
110	1,189912(9)	-1,59876018776(9)	0,8465983(5)	-0,55763621365(9)	-0,1945256(4)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.35 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $6d_{3/2}$ ($n = 6, \kappa = 2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,5374785(5)	-109,415213(2)	108,9(7)	-0,499405(2)	-0,0769(2)
18	0,53966728(6)	-34,1883321(2)	33,611(2)	-0,5006224(2)	-0,077167(9)
20	0,54039628(8)	-27,80787961(7)	27,22973(10)	-0,50104056(7)	-0,077261(8)
24	0,54207709(2)	-19,49704204(4)	18,91756(3)	-0,50201202(4)	-0,077491(3)
26	0,543031008(4)	-16,70320786(3)	16,123035(3)	-0,50256578(3)	-0,077626(4)
30	0,54517240(2)	-12,69853968(2)	12,116810(2)	-0,50381065(2)	-0,0779300(3)
32	0,546362960(6)	-11,23535991(2)	10,652764(3)	-0,50450241(2)	-0,078101(2)
36	0,5489925735(4)	-9,007099321(6)	8,422597(3)	-0,506026380(6)	-0,078481(2)
40	0,551966828(5)	-7,414030888(6)	6,827383(2)	-0,507740365(6)	-0,0789110(5)
44	0,5553035891(3)	-6,236154251(3)	5,6471148(7)	-0,509648051(3)	-0,0793935(3)
50	0,561033018(2)	-4,972287337(2)	4,3791871(2)	-0,512881986(2)	-0,0802192(3)
54	0,5653691019(5)	-4,354424544(2)	3,7582905(3)	-0,515293164(2)	-0,0808414(6)
60	0,572713651(3)	-3,6505421499(8)	3,049346(2)	-0,5193063123(8)	-0,0818896(4)
66	0,5811576900(3)	-3,1317178277(7)	2,524819(2)	-0,5238137018(7)	-0,0830848(4)
70	0,58745546(3)	-2,8585967208(5)	2,247522(2)	-0,5271048058(5)	-0,0839699(4)
74	0,59433391259(10)	-2,6295299793(5)	2,013965(2)	-0,5306339378(5)	-0,0849309(3)
80	0,6058389(3)	-2,3500276692(3)	1,7271087(9)	-0,5363929590(3)	-0,0865263(4)
83	0,61217198(6)	-2,2333201765(3)	1,6064311(7)	-0,5394905806(3)	-0,0873989(4)
90	0,6286236(6)	-2,0072386787(2)	1,3702738(7)	-0,5473148115(2)	-0,0896505(4)
92	0,6337915(5)	-1,9525535967(2)	1,3124896(8)	-0,54971025135(10)	-0,0903541(4)
100	0,6568075(3)	-1,7684421223(2)	1,114917(2)	-0,5600489402(2)	-0,0934762(4)
110	0,691680(4)	-1,59876018776(9)	0,9257308(6)	-0,57481638928(9)	-0,0982131(4)

TAB. D.36 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $6d_{5/2}$ ($n = 6$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,45379578(8)	-109,180825(2)	108,7(3)	-0,313410(2)	-0,09569(9)
18	0,45517607(2)	-33,9528372(2)	33,544(2)	-0,3137604(2)	-0,095771(9)
20	0,45562287(8)	-27,5720092(2)	27,16249(9)	-0,3138847(2)	-0,095784(8)
24	0,456636429(5)	-19,26029908(6)	18,85033(3)	-0,31417372(6)	-0,095823(4)
26	0,457202882(2)	-16,46596725(4)	16,0557995(2)	-0,31433839(4)	-0,095848(2)
30	0,458455100(10)	-12,46017918(3)	12,049575(2)	-0,31470798(3)	-0,0959067(8)
32	0,459141039(7)	-10,99637639(2)	10,585531(3)	-0,31491298(2)	-0,0959397(6)
36	0,4606333450(7)	-8,76674138(2)	8,355368(4)	-0,31536357(2)	-0,0960145(2)
40	0,462287588(6)	-7,172124039(7)	6,760159(2)	-0,315868636(7)	-0,0960997(4)
44	0,4641056636(6)	-5,992519552(5)	5,5798979(7)	-0,316428640(5)	-0,0961949(3)
50	0,467144466(2)	-4,725714167(3)	4,3119850(2)	-0,317372833(3)	-0,0963572(3)
54	0,4693811154(2)	-4,105652808(2)	3,6911011(3)	-0,318072634(2)	-0,0964796(5)
60	0,473056975(3)	-3,398096616(2)	2,9821818(7)	-0,319229537(2)	-0,0966855(5)
66	0,477122516(5)	-2,8751244836(9)	2,457687(2)	-0,3205173688(9)	-0,0969198(3)
70	0,48005120(2)	-2,5989604545(8)	2,180417(2)	-0,3214500623(8)	-0,0970932(3)
74	0,483155172(2)	-2,3666172781(6)	1,9468925(5)	-0,3224431431(6)	-0,0972816(4)
80	0,48813958(4)	-2,0817385462(5)	1,6600963(9)	-0,3240481933(5)	-0,0975943(4)
83	0,4907789(2)	-1,9621240005(4)	1,5394551(7)	-0,3249036516(4)	-0,0977656(4)
90	0,4973142(4)	-1,7286523873(3)	1,3034036(6)	-0,3270403847(3)	-0,0982088(4)
92	0,4992771(2)	-1,6716912777(3)	1,2456561(7)	-0,3276877614(3)	-0,0983477(4)
100	0,50754210(4)	-1,4776842055(2)	1,0482712(10)	-0,3304460242(2)	-0,0989672(4)
110	0,518766(2)	-1,2936650642(2)	0,8594571(4)	-0,3342877500(2)	-0,0999203(4)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.37 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $6f_{5/2}$ ($n = 6, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,3544008(2)	-109,180825(2)	108,8(5)	-0,318402(2)	-0,0565(3)
18	0,35497522(5)	-33,9528372(2)	33,579(2)	-0,3187703(2)	-0,056510(3)
20	0,3551663(2)	-27,5720092(2)	27,1981(10)	-0,3189007(2)	-0,05654(2)
24	0,35560552(2)	-19,26029908(6)	18,8850(4)	-0,31920381(6)	-0,056593(4)
26	0,355853624(4)	-16,46596725(4)	16,0903(2)	-0,31937648(4)	-0,056623(2)
30	0,35640699(2)	-12,46017918(3)	12,08381(6)	-0,31976406(3)	-0,0566963(3)
32	0,356712384(10)	-10,99637639(2)	10,61972(4)	-0,31997905(2)	-0,0567386(2)
36	0,3573810854(7)	-8,76674138(2)	8,38951(3)	-0,32045164(2)	-0,056830(2)
40	0,358127838(8)	-7,172124039(7)	6,79424(2)	-0,320981443(7)	-0,0569343(5)
44	0,3589538597(2)	-5,992519552(5)	5,613915(6)	-0,321568962(5)	-0,0570503(3)
50	0,360344782(3)	-4,725714167(3)	4,345914(4)	-0,322559760(3)	-0,0572460(4)
54	0,361375876(2)	-4,105652808(2)	3,724970(5)	-0,323294276(2)	-0,0573922(2)
60	0,363083324(3)	-3,398096616(2)	3,0159543(5)	-0,324508898(2)	-0,0576346(5)
66	0,3649907821(6)	-2,8751244836(9)	2,491357(2)	-0,3258614626(9)	-0,0579066(3)
70	0,366377925(7)	-2,5989604545(8)	2,214015(2)	-0,3268413553(8)	-0,0581046(3)
74	0,367860871(2)	-2,3666172781(6)	1,9804169(6)	-0,3278849858(6)	-0,0583166(3)
80	0,370271920(8)	-2,0817385462(5)	1,693505(2)	-0,3295723818(5)	-0,0586616(4)
83	0,37156457(2)	-1,9621240005(4)	1,5728055(9)	-0,3304720558(4)	-0,0588467(3)
90	0,37481741(4)	-1,7286523873(3)	1,3366195(6)	-0,3327202291(3)	-0,0593130(4)
92	0,375809869(6)	-1,6716912777(3)	1,278835(2)	-0,3334016524(3)	-0,0594553(4)
100	0,38007470(4)	-1,4776842055(2)	1,081310(2)	-0,3363064623(2)	-0,0600679(4)
110	0,386110(2)	-1,2936650642(2)	0,8923702(4)	-0,3403563457(2)	-0,0609382(4)

TAB. D.38 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $7s_{1/2}$ ($n = 7$, $\kappa = -1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	6,457427(5)	-128,2707492(4)	127,9(4)	-0,9946185(4)	-0,46725(5)
18	5,1981701(6)	-40,5152399(2)	39,08(3)	-1,0011442(2)	-0,40263(10)
20	4,989504(2)	-33,07453971(7)	31,67(2)	-1,00337702(7)	-0,38699(5)
24	4,6436029(6)	-23,38597379(4)	22,019(3)	-1,00857846(4)	-0,35622(3)
26	4,4984364(3)	-20,13076920(3)	18,7764(9)	-1,01155270(3)	-0,34115(2)
30	4,2502446(3)	-15,46837349(2)	14,1379(4)	-1,01826398(2)	-0,31145(4)
32	4,14346773(2)	-13,766804045(10)	12,4475(3)	-1,022007969(10)	-0,29682(3)
36	3,95769971(10)	-11,179416484(8)	9,8809(2)	-1,030291385(8)	-0,267926(8)
40	3,8024473(3)	-9,334936925(4)	8,05571(9)	-1,039661751(4)	-0,239430(10)
44	3,67192545(3)	-7,976858400(3)	6,71546(3)	-1,050151252(3)	-0,211196(5)
50	3,51369763(3)	-6,5307124356(10)	5,29352(2)	-1,0680497997(10)	-0,169115(8)
54	3,42907174(4)	-5,831932689(2)	4,60936(2)	-1,081458972(2)	-0,141096(4)
60	3,32845751(6)	-5,0493076977(9)	3,846524(9)	-1,1038018949(9)	-0,098970(3)
66	3,2555130(2)	-4,4903380806(6)	3,304921(3)	-1,1287125524(6)	-0,0567005(8)
70	3,2208568(4)	-4,2077252533(3)	3,032579(5)	-1,1465631347(3)	-0,028580(3)
74	3,196863(2)	-3,9813820919(3)	2,815470(3)	-1,1651206415(3)	-0,0007892(5)
80	3,180706(3)	-3,7276549662(2)	2,5735841(6)	-1,1931507971(2)	0,039082(2)
83	3,181791(2)	-3,6336309564(2)	2,4845157(8)	-1,2063893266(2)	0,057276(2)
90	3,21024(2)	-3,48802416669(10)	2,3475807(3)	-1,22947315558(10)	0,0890303(7)
92	3,22575(2)	-3,46423356835(9)	2,3253994(3)	-1,23189507930(9)	0,0930612(5)
100	3,32842(4)	-3,44786695439(9)	2,3102376(4)	-1,19009488254(9)	0,052460(2)
110	3,59069(7)	-3,63607951308(3)	2,480253(2)	-0,59460165017(3)	-0,5555(6)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.39 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $7p_{1/2}$ ($n = 7, \kappa = 1$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	1,0759738(2)	-128,2707492(5)	128,2(6)	-1,0534184(5)	-0,1127(2)
18	1,1074598(3)	-40,5152399(2)	39,31(3)	-1,0614413(2)	-0,11410(10)
20	1,11701487(9)	-33,07453970(7)	31,89(2)	-1,06419568(7)	-0,11449(5)
24	1,13798097(5)	-23,38597379(4)	22,198(2)	-1,07063217(4)	-0,11536(2)
26	1,149369825(5)	-20,13076920(3)	18,9392(7)	-1,07432563(3)	-0,11585(2)
30	1,17393268(6)	-15,46837349(2)	14,2682(4)	-1,08269595(2)	-0,11690(2)
32	1,18710679(3)	-13,766804045(9)	12,5615(3)	-1,087387933(9)	-0,117446(10)
36	1,21526318(3)	-11,179416484(7)	9,9628(2)	-1,097828679(7)	-0,118586(5)
40	1,2458926(2)	-9,334936926(4)	8,10532(6)	-1,109744619(4)	-0,119761(2)
44	1,27910652(3)	-7,976858400(3)	6,73263(4)	-1,123226485(3)	-0,1209449(5)
50	1,33412242(3)	-6,530712436(2)	5,26139(2)	-1,146618659(2)	-0,1226768(7)
54	1,374571154(5)	-5,831932689(2)	4,54365(2)	-1,164507162(2)	-0,1237625(5)
60	1,44159580(10)	-5,0493076977(9)	3,728938(5)	-1,1951418667(9)	-0,1252225(3)
66	1,5173457(3)	-4,4903380805(6)	3,133070(3)	-1,2308396708(6)	-0,1264223(4)
70	1,5734814(4)	-4,2077252533(3)	2,8228900(10)	-1,2577560450(3)	-0,1270750(6)
74	1,6348378(10)	-3,9813820919(3)	2,5663421(5)	-1,2873844760(3)	-0,1276526(6)
80	1,738409(4)	-3,7276549662(2)	2,2617497(10)	-1,3372513292(2)	-0,1286523(5)
83	1,796313(5)	-3,6336309564(2)	2,1394780(10)	-1,3646859864(2)	-0,1294659(3)
90	1,95134(2)	-3,4880241667(2)	1,9193523(7)	-1,4345093695(2)	-0,1341619(3)
92	2,00181(2)	-3,46423356835(9)	1,8717313(8)	-1,45546901211(9)	-0,1370329(4)
100	2,240677(2)	-3,44786695439(10)	1,7458944(10)	-1,53327172475(10)	-0,1687030(6)
110	2,66895(2)	-3,63607951307(3)	1,752362(2)	-1,44064404322(3)	-0,4400(4)

TAB. D.40 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $7p_{3/2}$ ($n = 7$, $\kappa = -2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,8158107(7)	-127,564884(3)	128,0(6)	-0,493525(3)	-0,16910(9)
18	0,8297328(4)	-39,7998983(2)	39,11(3)	-0,4946190(2)	-0,16943(3)
20	0,8338179(2)	-32,3559394(2)	31,68(2)	-0,4949969(2)	-0,16958(5)
24	0,84259219(5)	-22,65973557(6)	21,992(2)	-0,49587514(6)	-0,16976(2)
26	0,84725920(5)	-19,40013316(5)	18,7325(7)	-0,49637571(5)	-0,16988(2)
30	0,85710873(7)	-14,72772972(3)	14,0595(4)	-0,49750076(3)	-0,17013(2)
32	0,862278001(7)	-13,02052510(2)	12,3517(3)	-0,49812575(2)	-0,170271(8)
36	0,87308112(4)	-10,420531531(10)	9,7502(2)	-0,499502108(10)	-0,170571(5)
40	0,8844811(3)	-8,561550582(9)	7,88949(7)	-0,501049216(9)	-0,170902(2)
44	0,89646115(4)	-7,186914116(4)	6,51281(4)	-0,502770079(4)	-0,1712672(6)
50	0,91550685(4)	-5,711643362(4)	5,03404(2)	-0,505684674(4)	-0,1718901(3)
54	0,92892638(2)	-4,990236043(3)	4,31000(2)	-0,507855588(3)	-0,1723648(4)
60	0,95017104(6)	-4,168093212(2)	3,483431(8)	-0,511464712(2)	-0,1731879(6)
66	0,9728192(2)	-3,561731385(2)	2,872036(4)	-0,515512136(2)	-0,1741774(6)
70	0,98874642(8)	-3,2423088389(9)	2,548888(3)	-0,5184632395(9)	-0,1749531(7)
74	1,0053788(2)	-2,9742243555(8)	2,276758(2)	-0,5216238654(8)	-0,1758411(5)
80	1,031745(3)	-2,6467627684(4)	1,9425559(3)	-0,5267727882(4)	-0,1774321(3)
83	1,045610(5)	-2,5098616424(4)	1,8019545(5)	-0,5295377403(4)	-0,1783678(4)
90	1,079888(6)	-2,2442168822(4)	1,5266932(8)	-0,5365075153(4)	-0,1810152(6)
92	1,090209(6)	-2,1798388731(2)	1,4592854(9)	-0,5386372720(2)	-0,1819154(7)
100	1,134048(6)	-1,9625321410(3)	1,2283604(6)	-0,5478070787(3)	-0,1863644(5)
110	1,19505(3)	-1,7609502534(2)	1,0053816(7)	-0,5608415419(2)	-0,1947270(4)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.41 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $7d_{3/2}$ ($n = 7, \kappa = 2$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (*cf.* section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,5443157(7)	-127,564884(3)	127,9(8)	-0,505188(3)	-0,07742(4)
18	0,5464817(2)	-39,7998983(2)	39,20(3)	-0,5063564(2)	-0,07780(9)
20	0,547203166(2)	-32,3559394(2)	31,77(2)	-0,5067597(2)	-0,07787(4)
24	0,54886647(5)	-22,65973557(6)	22,0727(10)	-0,50769701(6)	-0,07808(3)
26	0,54981052(5)	-19,40013316(5)	18,8128(4)	-0,50823135(5)	-0,07821(2)
30	0,551930141(6)	-14,72772972(3)	14,1394(2)	-0,50943254(3)	-0,078510(8)
32	0,553108825(3)	-13,02052510(2)	12,4315(2)	-0,51009998(2)	-0,078680(5)
36	0,555712907(9)	-10,420531531(9)	9,82977(7)	-0,511570212(9)	-0,079065(5)
40	0,5586594(2)	-8,561550582(9)	7,96876(4)	-0,513223479(9)	-0,079497(2)
44	0,56196662(4)	-7,186914116(4)	6,59183(3)	-0,515063231(4)	-0,0799838(4)
50	0,56764883(2)	-5,711643362(4)	5,11263(2)	-0,518181142(4)	-0,0808202(3)
54	0,571952040(10)	-4,990236043(3)	4,388270(9)	-0,520505107(3)	-0,0814508(4)
60	0,57924612(9)	-4,168093212(2)	3,561203(4)	-0,524371756(2)	-0,0825120(4)
66	0,58763961(2)	-3,561731385(2)	2,9492924(7)	-0,528712613(2)	-0,0837226(4)
70	0,59390443(2)	-3,2423088389(8)	2,625808(2)	-0,5318807947(8)	-0,0846188(3)
74	0,6007511(2)	-2,9742243555(8)	2,3533545(10)	-0,5352768740(8)	-0,0855918(3)
80	0,612212(2)	-2,6467627684(4)	2,018739(2)	-0,5408160268(4)	-0,0872069(5)
83	0,618526(2)	-2,5098616424(4)	1,8779771(9)	-0,5437939832(4)	-0,0880901(4)
90	0,634940(3)	-2,2442168822(4)	1,6025363(8)	-0,5513116009(4)	-0,0903686(3)
92	0,640100(3)	-2,1798388731(2)	1,5351460(8)	-0,5536119264(2)	-0,0910806(3)
100	0,663098(4)	-1,9625321410(3)	1,3047597(6)	-0,5635334524(3)	-0,0942389(4)
110	0,69799(3)	-1,7609502534(2)	1,0842345(4)	-0,5776864255(2)	-0,0990295(4)

TAB. D.42 – Contributions numériques à la self énergie du niveau $7d_{5/2}$ ($n = 7$, $\kappa = -3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau. Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,4606496(2)	-127,330515(3)	127,9(8)	-0,319214(3)	-0,09628(4)
18	0,4620447(2)	-39,5644521(3)	39,13(3)	-0,3195488(3)	-0,09642(10)
20	0,46249648(4)	-32,1201289(2)	31,70(2)	-0,3196710(2)	-0,09640(4)
24	0,46352134(3)	-22,42307896(9)	22,0054(10)	-0,31995557(9)	-0,09641(2)
26	0,46409416(5)	-19,16299404(5)	18,7456(4)	-0,32011783(5)	-0,09644(2)
30	0,46536067(2)	-14,48950489(4)	14,0721(2)	-0,32048210(4)	-0,096492(8)
32	0,466054538(2)	-12,78169631(3)	12,3642(2)	-0,32068416(3)	-0,096528(7)
36	0,46756432(2)	-10,18037049(2)	9,76251(7)	-0,32112833(2)	-0,096608(4)
40	0,46923828(10)	-8,31988832(2)	7,90150(4)	-0,32162619(2)	-0,096698(2)
44	0,47107842(2)	-6,943577409(8)	6,52457(2)	-0,322178178(8)	-0,0968005(4)
50	0,474154909(8)	-5,465459487(5)	5,04536(2)	-0,323108795(5)	-0,0969781(5)
54	0,476419867(7)	-4,741922306(3)	4,321001(9)	-0,323798473(3)	-0,0971123(7)
60	0,48014312(6)	-3,916221223(3)	3,493943(4)	-0,324938527(3)	-0,0973367(3)
66	0,48426214(3)	-3,305843134(2)	2,8820393(10)	-0,326207430(2)	-0,0975925(4)
70	0,48722987(5)	-2,983474899(2)	2,5585642(8)	-0,327126300(2)	-0,0977816(5)
74	0,49037557(4)	-2,7122193541(10)	2,2861264(10)	-0,3281045574(10)	-0,0979864(4)
80	0,4954276(5)	-2,3795557558(8)	1,951542(2)	-0,3296854199(8)	-0,0983269(4)
83	0,498103(2)	-2,2398426457(6)	1,8108013(9)	-0,3305278708(6)	-0,0985129(4)
90	0,504728(2)	-1,9670518150(5)	1,5354258(8)	-0,3326317639(5)	-0,0989938(4)
92	0,506717(2)	-1,9004736133(4)	1,4680599(7)	-0,3332690922(4)	-0,0991443(4)
100	0,515094(3)	-1,6736045922(3)	1,2378062(7)	-0,3359840288(3)	-0,0998142(4)
110	0,5264675(10)	-1,4581784619(2)	1,0175737(4)	-0,3397640307(2)	-0,1008408(4)

D/3. Contributions numériques détaillées

TAB. D.43 – *Contributions numériques à la self énergie du niveau $7f_{5/2}$ ($n = 7, \kappa = 3$), pour différents numéros atomiques Z du noyau.* Dans la méthode numérique que nous utilisons, la self énergie est divisée en trois contributions calculées séparément : F_L (pour les particules de basse énergie virtuelle) et $F_{HA} + F_{HB}$ (pour les particules de grande énergie). Nous avons calculé par deux méthodes différentes (« 1 » et « 2 ») la partie haute énergie (cf. section D/1).

Z	F_L	F_{HA}^1	F_{HB}^1	F_{HA}^2	F_{HB}^2
10	0,3610289(2)	-127,330515(3)	127,7(9)	-0,324206(3)	-0,05699(3)
18	0,3616075(3)	-39,5644521(3)	39,17(2)	-0,3245567(3)	-0,05718(9)
20	0,36180011(5)	-32,1201289(2)	31,737(7)	-0,3246845(2)	-0,05715(4)
24	0,36224263(4)	-22,42307896(9)	22,04084(5)	-0,32498200(9)	-0,05718(2)
26	0,36249260(6)	-19,16299404(5)	18,78053(9)	-0,32515161(5)	-0,05722(2)
30	0,36305014(2)	-14,48950489(4)	14,106638(6)	-0,32553243(4)	-0,057287(9)
32	0,363357863(2)	-12,78169631(3)	12,39859(2)	-0,32574368(3)	-0,057332(9)
36	0,36403172(2)	-10,18037049(2)	9,796725(10)	-0,32620808(2)	-0,057427(3)
40	0,36478433(5)	-8,31988832(2)	7,935617(7)	-0,32672867(2)	-0,057539(2)
44	0,36561701(2)	-6,943577409(8)	6,558605(5)	-0,327305953(8)	-0,0576644(4)
50	0,367019609(6)	-5,465459487(5)	5,079301(3)	-0,328279387(5)	-0,0578774(7)
54	0,368059766(3)	-4,741922306(3)	4,3548832(7)	-0,329000948(3)	-0,0580370(3)
60	0,36978302(4)	-3,916221223(3)	3,5277252(7)	-0,330193988(3)	-0,0583012(3)
66	0,37170936(3)	-3,305843134(2)	2,9157228(5)	-0,331522284(2)	-0,0585977(4)
70	0,37311104(3)	-2,983474899(2)	2,5921764(7)	-0,332484439(2)	-0,0588139(3)
74	0,37461027(2)	-2,7122193541(10)	2,3196650(5)	-0,3335090349(10)	-0,0590451(3)
80	0,3770494(2)	-2,3795557558(8)	1,9849688(5)	-0,3351653399(8)	-0,0594215(3)
83	0,37835793(3)	-2,2398426457(6)	1,8441707(5)	-0,3360482785(6)	-0,0596236(3)
90	0,3816531(2)	-1,9670518151(5)	1,5686650(5)	-0,3382541501(5)	-0,0601328(3)
92	0,3826592(2)	-1,9004736133(4)	1,5012628(4)	-0,3389226159(4)	-0,0602882(3)
100	0,386985(2)	-1,6736045922(3)	1,2708758(3)	-0,3417714823(3)	-0,0609574(3)
110	0,393116(4)	-1,4581784619(2)	1,0505286(5)	-0,3457414596(2)	-0,0619084(4)

Bibliographie

- ABRAMOVITZ, M. and STEGUN, I. A., editors (1972). *Handbook of mathematical functions*. Dover publications, Inc., New York, 9th edition. Cité p. 32, 239, 240, 241, 245, 246, 251, 254
- AKHIEZER, A. I. and BERESTETSKII, V. B. (1965). *Quantum electrodynamics*, volume XI of *Interscience monographs and texts in physics and astronomy*. Interscience Publishers. Cité p. 77, 86
- ANDERSON, C. D. (1932). *Science* **76** 238. Cité p. 11
- ANDERSON, C. D. (1933). *Phys. Rev.* **43** 491. Cité p. 11
- ANDRÄ, H. J. (1978). Fast-Beam (Beam-Foil) Spectroscopy. In HANLE and KLEINPOPPEN [1978], chapter 20. Cité p. 14
- APS (1999). Centennial edition. *Rev. Mod. Phys.* **71**(2) S1–S488. Cité p. 10
- ARTEMYEV, A. N., BEIER, T., PLUNIEN, G., *et al.* (1999). Vacuum-polarization screening corrections to the energy levels of lithiumlike ions. *Phys. Rev. A* **60**(1) 45. Cité p. 30, 31, 106, 160
- ARTEMYEV, A. N., BEIER, T., PLUNIEN, G., *et al.* (2000). Vacuum-polarization screening corrections to the energy levels of heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **62** 022116. Cité p. 5, 30, 31, 36, 90, 94, 103, 156, 159, 160, 162, 167, 173, 177, 204, 219, 258
- ARTEMYEV, A. N., SHABAEV, V. M., and YEROKHIN, V. A. (1995a). Nuclear recoil corrections to the $2p_{3/2}$ state energy of hydrogen-like and high- Z lithium-like atoms in all orders in αZ . *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 5201. Cité p. 34
- ARTEMYEV, A. N., SHABAEV, V. M., and YEROKHIN, V. A. (1995b). Relativistic nuclear recoil corrections to the energy levels of hydrogenlike and high- Z lithiumlike atoms in all orders in αZ . *Phys. Rev. A* **52**(3) 1884–1894. Cité p. 31, 40, 60

BIBLIOGRAPHIE

- ARTEMYEV, A. N., SHABAEV, V. M., and YEROKHIN, V. A. (1997). Vacuum polarization screening corrections to the ground-state energy of two-electron ions. *Phys. Rev. A* **56** 3529–3534. Cité p. 106, 160
- BAKER, J. D., FREUND, D. E., HILL, R. N., *et al.* (1990). Radius of convergence and analytic behavior of the $1/Z$ expansion. **41** 1247–1273. Cité p. 26
- BARANGER, M., BETHE, H. A., and FEYNMAN, R. P. (1953). Relativistic Correction to the Lamb Shift. *Phys. Rev.* **92** 482–501. Cité p. 32, 225, 226
- BASHKIN, S. (1964). *Nucl. Instr. Methods* **28** 88. Cité p. 14
- BEIER, T. (2000). The g_j factor of a bound electron and the hyperfine structure splitting in hydrogenlike ions. *Phys. Rep.* **339**(2–3) 79–213. Cité p. 9, 34, 105
- BEIER, T., LINDGREN, I., PERSSON, H., *et al.* (2000). The g_j factor of an electron bound in a hydrogenlike ions. *Phys. Rev. A* **62** 032510. Cité p. 58
- BEIER, T., MOHR, P. J., PERSSON, H., *et al.* (1998). Influence of nuclear size on QED corrections in hydrogenlike heavy ions. *Phys. Rev. A* **58**(2) 954–963. Cité p. 33, 34
- BEIERSDORFER, P., OSTERHELD, A. L., SCOFIELD, J. H., *et al.* (1998). Measurement of QED and Hyperfine Splitting in the $2s_{1/2}$ - $2p_{3/2}$ X-ray transition in Li-like $^{209}\text{Bi}^{80+}$. *Phys. Rev. Lett.* **80** 3022–3025. Cité p. 20, 35
- BETHE, H. (1947). *Phys. Rev.* **72** 339. Cité p. 9, 13, 22, 24
- BEYER, H. F. (1995a). The $1s$ Lamb Shift of Hydrogen-Like Very Heavy Ions Measured at an Electron Cooler. *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **44** 510. Cité p. 16, 21, 23
- BEYER, H. F. (1995b). X-ray spectroscopy of highly-charged ions in a storage ring. In LIESEN [1995], p. 31. Cité p. 7, 16, 20
- BEYER, H. F., DESLATTES, R. D., FOLKMANN, F., *et al.* (1985a). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 207. Cité p. 20
- BEYER, H. F., DESLATTES, R. D., FOLKMANN, F., *et al.* (1985b). Determination of the $1s$ Lamb Shift in One-Electron Argon Recoil Ions. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 207–215. Cité p. 14
- BEYER, H. F., FINLAYSON, K. D., LIESEN, D., *et al.* (1993). *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 1557. Cité p. 20

- BEYER, H. F., INDELICATO, P., FINLAYSON, K. D., *et al.* (1991). Measurement of the $1s$ Lamb shift in hydrogenlike nickel. *Phys. Rev. A* **43** 223. Cité p. 14, 20
- BEYER, H. F., LIESEN, D., BOSCH, F., *et al.* (1994). *Phys. Lett. A* **184** 435. Cité p. 20
- BEYER, H. F. and SHEVELKO, V. P., editors (1999). *Atomic Physics with Heavy Ions*. Atoms and Plasmas. Springer. Cité p. 3, 349, 358
- BEYER, H. F. and STÖHLKER, T. (1998). Test of QED in High-Z Hydrogen-Like Systems. In *Frontier Tests of QED and Physics of the Vacuum*, edited by ZAVATTINI, E., BAKALOV, D., and RIZZO, C., p. 356. Heron Press, Sofia. Cité p. 16
- BIRABEN, F., HÄNSCH, T. W., FISCHER, M., *et al.* (2001). Precision Spectroscopy of Atomic Hydrogen. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 17. Cité p. 7, 8, 9, 17, 18, 35, 37, 227
- BIRKETT, B. B., BRIAND, J.-P., CHARLES, P., *et al.* (1993). Hyperfine Quenching and Measurement of the $2^3P_0-2^3P_1$ Fine-Structure Splitting in Heliumlike Silver (Ag^{45+}). *Phys. Rev. A* **47**(4) R2454–R2457. Cité p. 20
- BJORKEN, J. D. and DRELL, S. D. (1965). *Relativistic Quantum Fields*. Mc-Graw-Hill, New York. Cité p. 134, 135, 279
- BLUHM, R. (2001). Lorentz and CPT Test in QED. In CANTATORE [2001], p. 101. Cité p. 6
- BLUNDELL, S. A. (1992). Accurate Screened QED Calculations in high-Z Many-electron Ions. *Phys. Rev. A* **46** 3762–3775. Cité p. 31
- BLUNDELL, S. A. (1993). Calculations of the screened self-energy and vacuum polarization in Li-like, Na-like and Cu-like ions. *Phys. Rev. A* **47** 1790–1803. Cité p. 23, 28, 29, 31, 160
- BLUNDELL, S. A., CHENG, K. T., and SAPIRSTEIN, J. (1997). All-order binding corrections to muonium hyperfine splitting. *Phys. Rev. Lett.* **78** 4914–4917. Cité p. 58
- BLUNDELL, S. A., JOHNSON, W. R., LIU, Z. W., *et al.* (1989). Relativistic All-Orders Equations for Helium. *Phys. Rev. A* **39**(8) 3768–3775. Cité p. 24
- BLUNDELL, S. A., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1988a). Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the lithium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **37** 2764. Cité p. 24, 29, 31

BIBLIOGRAPHIE

- BLUNDELL, S. A., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1988b). Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the sodium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **38** 2699. Cité p. 29
- BLUNDELL, S. A., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1990a). Improved Many-Body Perturbation Theory Calculations of the $n = 2$ States of Lithiumlike Uranium. *Phys. Rev. A* **41** 1698–1700. Cité p. 24, 29
- BLUNDELL, S. A., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1990b). Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the copper isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **42** 1087. Cité p. 29
- BLUNDELL, S. A., MOHR, P. J., JOHNSON, W. R., *et al.* (1993). Evaluation of two-photon exchange graphs for highly charged heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **48** 2615–2626. Cité p. 29, 59, 111, 160, 167, 181, 219
- BLUNDELL, S. A. and SNYDERMAN, N. J. (1991). Basis set approach to calculating the radiative self-energy in highly ionized atoms. *Phys. Rev. A* **44** R1427–R1430. Cité p. 226
- BODWIN, G. T., YENNIE, D. R., and GREGORIO, M. A. (1985). Recoil effects in the hyperfine structure of QED bound states. *Rev. Mod. Phys.* **57** 723–782. Cité p. 34, 40
- BOGOLIUBOV, N. N. and SHIRKOV, D. V. (1980). *Introduction to the theory of quantized fields*. John Wiley & sons, third edition. Cité p. 46, 77, 85, 260, 264, 265
- BOHR, N. (1913). *Phil. Mag.* **26**(1) 476. Cité p. 10
- BONCH-BRUEVICH, V. L. and TYABLIKOV, S. V. (1962). *The Green function method in Statistical Mechanics*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam. Cité p. 77
- BOSSELMANN, P., STAUDE, U., HORN, D., *et al.* (1999). Measurements of $2s^2S_{1/2}$ – $2p^2P_{1/2,3/2}$ transition energies in lithiumlike heavy ions. II. Experimental results for Ag^{44+} and discussion along the isoelectronic series. *Phys. Rev. A* **59** 1874. Cité p. 20
- BOURZEIX, S., DE BEAUVOIR, B., NEZ, F., *et al.* (1996). High resolution spectroscopy of the hydrogen atom: Determination of the 1s Lamb shift. *Phys. Rev. Lett.* **76** 384–387. Cité p. 223
- BRAUN, G. E. and SCHAEFER, G. W. (1956). *Proc. R. Soc. London* **A233** 527. Cité p. 112
- BRAUN, M. A., GURCHUMELIA, A. D., and SAFRONOVA, U. I. (1984). *Relativistic Atom Theory*. Nauka, Moscow. Cité p. 60

- BRAUN, M. A. and SHIROKOV, A. V. (1977). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz* **41** 2585. Cité p. 60
- BREIT, G. (1929). The Effect of Retardation on the Interaction of Two Electrons. *Phys. Rev.* **34** 553. Cité p. 23
- BREIT, G. (1932). Dirac's Equation and the Spin-Spin Interactions of Two Electrons. *Phys. Rev.* **39** 616. Cité p. 23
- BRIAND, J.-P., CHEVALLIER, P., INDELICATO, P., *et al.* (1990). Observation and Measurement of $n = 2 \rightarrow n = 1$ Transitions of Hydrogenlike and Heliumlike Uranium. *Phys. Rev. Lett.* **65** 2761. Cité p. 8, 14, 20
- BRIAND, J.-P., INDELICATO, P., SIMIONOVICI, A., *et al.* (1989). Spectroscopic Study of Hydrogenlike and Heliumlike Xenon Ions. *Eur. Phys. Lett.* **9**(3) 225–230. Cité p. 20
- BRIAND, J.-P., TAVERNIER, M., INDELICATO, P., *et al.* (1983). High Precision Spectroscopic Studies of Lyman α Lines of Hydrogenlike Iron: A Measurement of the 1s Lamb-Shift. *Phys. Rev. Lett.* **50** 832. Cité p. 14, 20
- BRINK, D. M. and SATCHLER, G. R. (1993). *Angular momentum*. Oxford University Press, Oxford, third edition. Cité p. 241, 247, 253
- BROUDER, C. and FRABETTI, A. (2001). Renormalization of QED with planar binary trees. *Eur. Phys. J. C* **19** 715–741. Cité p. 260
- BROWN, G. E., LANGER, J. S., and SCHAEFER, G. W. (1959). Lamb shift of a tightly bound electron: I. Method. *Proc. R. Soc. London* **A251** 92–104. Cité p. 28, 32, 112, 227, 228
- BROWN, G. E. and MAYERS, D. F. (1959). Lamb shift of a tightly bound electron: II. Calculation for the K electron in mercury. *Proc. R. Soc. London* **A251** 105–109. Cité p. 28
- BROWN, H. N., BUNCE, G., CAREY, R. M., *et al.* (2001). Precise Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment. *Phys. Rev. Lett.* **86**(11) 2227–2231. Cité p. 7, 20, 40, 260
- CANTATORE, G., editor (2001). *Quantum electrodynamics and physics of the vacuum — QED 2000*, volume 564 of *AIP conference proceedings*. American Institute of Physics. Cité p. 341, 353
- CASTILLEGA, J., LIVINGSTON, D., SANDERS, A., *et al.* (2000). Precise Measurement of the J=1 to J=2 Fine Structure Interval in the 2^3P State of Helium. *Phys. Rev. Lett.* **84** 4321–4324. Cité p. 19, 159

BIBLIOGRAPHIE

- CHAUVIN, N., BRUANDET, J. F., CURDY, J. C., *et al.* (1998). Electron Cyclotron Resonance Ion Trap, a multicharged ion breeder/buncher. *Nucl. Instr. Methods A* **419** 185. Cité p. 15
- CHEN, M. H., CHENG, K. T., JOHNSON, W. R., *et al.* (1995). *Phys. Rev. A* **52** 266. Cité p. 29, 160
- CHENG, K. T. and CHEN, M. H. (2000). Energy levels of the low-lying states of mid- Z heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **61**(4) 044503/1–4. Cité p. 30
- CHENG, K. T., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1991). Screened Lamb Shift Calculations for Lithiumlike Uranium, Sodiumlike Platinum and Copperlike Gold. *Phys. Rev. Lett.* **66**(23) 2960–2963. Cité p. 24, 31
- COHEN-TANNOUJJI, C., DIU, B., and LALOË, F. (1977). *Mécanique quantique*, volume 2. Hermann, Paris. Cité p. 8, 21, 57, 124
- COHEN-TANNOUJJI, C., DUPONT-ROC, J., and GRYNBERG, G. (1987). *Photons et atomes — Introduction à l'électrodynamique quantique*. Savoirs actuels. InterEditions/Editions du CNRS, Paris. Cité p. 46, 49, 57, 112
- CONTI, R. S., VALLERY, R. S., GIDLEY, D. W., *et al.* (2001). Experimental Tests of QED in Positronium: Recent Advances. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 103. Cité p. 21
- DARWIN, C. G. (1927). *Proc. R. Soc. London* **A116** 227. Cité p. 11
- DARWIN, C. G. (1928a). *Proc. R. Soc.* **A118** 654. Cité p. 11
- DARWIN, C. G. (1928b). *Proc. R. Soc.* **A120** 621. Cité p. 11
- DE BEAUVOIR, B., NEZ, F., JULIEN, L., *et al.* (1997). Absolute Frequency Measurement of the 2S-8S/D Transitions in Hydrogen and Deuterium: New Determination of the Rydberg Constant. *Phys. Rev. Lett.* **78** 440–443. Cité p. 17, 223
- DE BEAUVOIR, B., SCHWOB, C., ACEF, O., *et al.* (2000). Metrology of the hydrogen and deuterium atoms: Determination of the Rydberg constant and Lamb shifts. *Eur. Phys. J. D* **12** 61–93. Cité p. 7, 17, 18, 21, 25, 223
- DE BROGLIE, L. (1924). *Phil. Mag.* **47** 446. Cité p. 11
- DE BROGLIE, L. (1925). *Ann. de Phys.* **3** 22. Cité p. 11
- DE SZÖKEFALVI-NAGY, B. (1946/1947). Perturbations des transformations autoadjointes dans l'espace de Hilbert. *Commun. Math. Helv.* **19** 347. Cité p. 94

- DESCLAUX, J.-P. (1975). A Multiconfiguration Relativistic Dirac-Fock Program. *Comput. Phys. Commun.* **9** 31–45. Cité p. 34
- DESCLAUX, J. P. (1983). Relativity in electronic structure: how and why? In MARRUS [1983], p. 75. Cité p. 21, 22
- DESCLAUX, J.-P. (1993). A Relativistic Multiconfiguration Dirac-Fock Package. In *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, edited by CLEMENTI, E., volume A of *METTEC*. STEF, Cagliari. Cité p. 34
- DESIDERIO, A. M. and JOHNSON, W. R. (1971). Lamb Shift and Binding Energies of K electrons in Heavy Atoms. *Phys. Rev. A* **3** 1267–1275. Cité p. 8, 28, 227, 228
- DESLATTES, R. D. (1985). Accurate spectroscopy of single-electron and single-vacancy ions. In KELLY and KIM [1985], p. 80. Cité p. 20
- DESLATTES, R. D., BEYER, H. F., and FOLKMANN, F. (1984). Precision X-Ray Wavelength Measurements in Heliumlike Argon Recoil Ions. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** L689–L694. Cité p. 14
- DESLATTES, R. D., SCHUCH, R., and JUSTINIANO, E. (1985). Application of Decelerated Bare Nuclei to Precision Spectroscopy of One-Electron Ions. *Phys. Rev. A* **32**(3) 1911–1913. Cité p. 14
- DIRAC, P. A. M. (1926). *Proc. R. Soc.* **A117** 351. Cité p. 11, 22
- DIRAC, P. A. M. (1931). *Proc. R. Soc.* **133** 60. Cité p. 11
- DONOGHUE, J. F., GOLOWICH, E., and HOLSTEIN, B. R. (1992). *Dynamics of the Standard Model*. Cambridge Monograph on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology. Cambridge University Press, Cambridge. Cité p. 3
- DORRER, C., NEZ, F., DE BEAUVOIR, B., *et al.* (1997). Accurate Measurement of the 2^3S_1 - 3^3D_1 Two-Photon Transition Frequency in Helium: New Determination of the 2^3S_1 Lamb Shift. *Phys. Rev. Lett.* **78**(19) 3658–3661. Cité p. 159
- DRAKE, G. W. F. (1987). New variational techniques for the $1snd$ states of helium. *Phys. Rev. Lett.* **59** 1549. Cité p. 26
- DRAKE, G. W. F., editor (1996a). AIP Press, Woodbury, New York. Cité p. 345, 355
- DRAKE, G. W. F. (1996b). *High precision calculation for Helium*, chapter 11, pp. 154–171. In DRAKE [1996a]. Cité p. 30

BIBLIOGRAPHIE

- DRAKE, G. W. F. (2001). Review of High Precision Theory and Experiment for Helium. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 57. Cité p. 19, 36
- DRAKE, G. W. F. and GOLDMAN, S. P. (2000). Bethe logarithms for Ps^- , H^- , and heliumlike atoms. *Can. J. Phys.* **77** 835–845. Cité p. 159
- DRAKE, G. W. F., KHRIPLOVICH, I. B., MILSTEIN, A. I., *et al.* (1993). Energy corrections of order $mc^2\alpha^6 \ln \alpha$ in helium. *Phys. Rev. A* **48** R15–R17. Cité p. 18, 26
- DRAKE, G. W. F. and MARTIN, W. C. (1998). Ionization energies and quantum electrodynamic effects in the lower $1sns$ and $1snp$ levels of neutral helium (^4He I). *Can. J. Phys.* **76** 679–698. Cité p. 159
- DRAKE, G. W. F. and SWAINSON, R. A. (1990). Bethe logarithms for hydrogen up to $n = 20$, and approximations for two-electron atoms. *Phys. Rev. A* **41**(3) 1243. Cité p. 238, 292
- DRINKWATER, J. W., RICHARDSON, O., and WILLIAMS, W. E. (1940). *Proc. R. Soc.* **174** 164. Cité p. 12
- DUNFORD, R. W., LIU, C. J., LAST, J., *et al.* (1991). Direct Observation of Hyperfine Quenching of the 2^3P_0 Level in Heliumlike Nickel. *Phys. Rev. A* **44**(1) 764–767. Cité p. 20
- DYSON, F. J. (1949a). *Phys. Rev.* **75** 486. Cité p. 13, 27
- DYSON, F. J. (1949b). *Phys. Rev.* **75** 1736. Cité p. 13, 27
- DZUBA, V. A., FLAMBAUM, V. V., and WEBB, J. K. (1999). Space-Time Variation of Physical Constants and Relativistic Corrections in Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **82**(5) 888–891. Cité p. 9
- EDMONDS, A. R. (1996). *Angular momentum in quantum mechanics*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey. Cité p. 240, 241, 245, 246, 247, 249, 253
- EIDES, M. I., GROUCH, H., and SHELYUTO, V. A. (2001). Theory of Light Hydrogenlike Atoms. *Phys. Rep.* **342**(2–3). Cité p. 22, 25
- EIDES, M. I. and SHELYUTO, V. A. (1995). Corrections of order $\alpha^2(Z\alpha)^5$ to the hyperfine splitting and the Lamb shift. *Phys. Rev. A* **52** 954–961. Cité p. 34
- EIKEMA, K. S., UBACHS, W., VASSEN, W., *et al.* (1996). Precision Measurements in Helium at 58 nm: Ground State Lamb Shift and the 1^1S-2^1P Transition Isotope Shift. *Phys. Rev. Lett.* **76**(8) 1216–19. Cité p. 18, 19

- EIKEMA, K. S., UBACHS, W., VASSEN, W., *et al.* (1997). Lamb shift measurement in the 1^1S ground state of helium. *Phys. Rev. A* **55** 1866–1884. Cité p. 159
- ERICKSON, G. W. and YENNIE, D. R. (1965). *Ann. Phys. (NY)* **35** 271–313. Cité p. 238, 292
- FAUSTOV, R. N. (1970). *Theor. Math. Phys.* **3**(2). Cité p. 66, 75, 77
- FELDMAN, G. and FULTON, T. (1987). *Ann. Phys. (NY)* **179** 20. Cité p. 60
- FELDMAN, U., SUGAR, J., and INDELICATO, P. (1990). Magnetic Dipole Line Predicted at 3193 Å from U LXXI Ground Term. *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 3–5. Cité p. 223
- FEYNMAN, R. P. (1948a). A Relativistic Cut-Off for Classical Electrodynamics. *Phys. Rev.* **74** 939. Cité p. 13
- FEYNMAN, R. P. (1948b). Relativistic Cut-Off for Quantum Electrodynamics. *Phys. Rev.* **74** 1430. Cité p. 13
- FEYNMAN, R. P. (1948c). Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys.* **20** 367. Cité p. 13
- FEYNMAN, R. P. (1949a). Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics. *Phys. Rev.* **76** 769. Cité p. 13
- FEYNMAN, R. P. (1949b). The Theory of Positrons. *Phys. Rev.* **76** 749. Cité p. 13
- FEYNMAN, R. P. (1950). Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction. *Phys. Rev.* **80** 440. Cité p. 13
- FOCK, V. (1933). *C. R. Leningrad* 267. Cité p. 12
- FRENCH, J. B. and WEISSKOPF, V. F. (1949). *Phys. Rev.* **75** 1240. Cité p. 13
- FUKUDA, H., MIYAMOTO, Y., and TOMONAGA, S. (1948a). *Progr. Theor. Phys.* **4** 47. Cité p. 13
- FUKUDA, H., MIYAMOTO, Y., and TOMONAGA, S. (1948b). *Progr. Theor. Phys.* **4** 121. Cité p. 13
- FURRY, W. H. (1951). On bound states and scattering in Positrons theory. *Phys. Rev. A* **81** 115–124. Cité p. 27, 40, 41
- FURRY, W. H. and OPPENHEIMER, J. R. (1934). *Phys. Rev.* **45** 245. Cité p. 12

BIBLIOGRAPHIE

- GAILLARD, M. K., GRANNIS, P. D., and SCIULLI, F. J. (1999). The Standard Model of Particle Physics. *Rev. Mod. Phys.* **71**(1) S96–S111. Cité p. 3
- GELL-MANN, M. and LOW, F. (1951). Bound States in Quantum Field Theory. *Phys. Rev.* **84** 350–354. Cité p. 27, 58
- GEORGE, M. C., LOMBARDI, L. D., and HESSELS, E. A. (2001). Precision Microwave Measurement of the $2^3P_1-2^3P_0$ Interval in Atomic Helium: A Determination of the Fine-Structure Constant. *Phys. Rev. Lett.* **87** 173002. Cité p. 6, 19, 20, 26, 31, 159, 260
- GIACOBINO, E. and BIRABEN, F. (1982). Energy Level Measurements and Lamb-Shift in Helium. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15**(11) L385–L388. Cité p. 18
- GLANS, P., LINDROTH, E., BADNELL, N. R., *et al.* (2001). Dielectronic recombination of N^{4+} . *Phys. Rev. A* **64** 043609. Cité p. 16
- GORCEIX, O., INDELICATO, P., and DESCLAUX, J.-P. (1987). Multiconfiguration Dirac-Fock studies of two-electron ions. I. Electron-electron interaction. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 639–650. Cité p. 23
- GORDON, W. (1928). *Z. f. Phys.* **48** 11. Cité p. 11
- GOTTA, D., ANAGNOSTOPOULOS, D. F., AUGSBURGER, M., *et al.* (1999). Balmer α Transitions in Antiprotonic Hydrogen and Deuterium. *Nucl. Phys. A* **660** 283–321. Cité p. 21
- GOULD, H. and MARRUS, R. (1983). Lamb shift and the lifetime of the $2^2S_{1/2}$ state of hydrogenlike argon ($Z=18$). *Phys. Rev. A* **28** 2001–2025. Cité p. 14
- GRANT, I. P. (1970). Relativistic calculation of atomic structures. *Adv. Phys.* **19**(82) 747–811. Cité p. 177, 192, 205
- GREINER, W., MÜLLER, B., and RAFELSKI, J. (1985). *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag. Cité p. 23, 42
- GYULASSY, M. (1975). *Nucl. Phys. A* **244** 497. Cité p. 34
- HAKEN, H. and WOLF, H. C. (1993). *The Physics of Atoms and Quanta: Introduction to Experiments and Theory*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, third edition. Cité p. 8, 10, 16, 20, 24, 222, 223
- HAND, L. N., MILLER, D. G., and WILSON, R. (1963). *Rev. Mod. Phys.* **35** 335. Cité p. 18

- HANLE, W. and KLEINPOPPEN, H., editors (1978). *Progress in Atomic Spectroscopy*. Plenum Press. Cité p. 3, 339
- HATFIELD, B. F. (1992). *Quantum field theory of point particles and strings*. Number 75 in Frontiers in Physics. Addison Wesley, Redwood City, California, USA. Cité p. 41, 46, 49, 50, 66, 67
- HEISENBERG, W. (1925). *Z. f. Phys.* **33** 879. Cité p. 11
- HEISENBERG, W. and JORDAN, P. (1926). *Z. f. Phys.* **37** 263. Cité p. 11
- HEISENBERG, W. and PAULI, W. (1929). *Z. f. Phys.* **56** 1. Cité p. 12
- HEISENBERG, W. and PAULI, W. (1930). *Z. f. Phys.* **59** 168. Cité p. 12
- HILL, A., ORTOLANI, F., and REMIDDI, E. (1989). The Bound State Problem in QED. In *The Hydrogen Atom*, edited by BASSANI, G. F., INGUSCIO, M., and HÄNSCH, T. W., p. 240, Berlin, Heidelberg. Springer. Cité p. 6
- HOUSTON, W. V. (1937). *Phys. Rev.* **51** 446. Cité p. 12
- HUGHES, V. W. and KINOSHITA, T. (1999). Anomalous g Values of the Electron and Muon. *Rev. Mod. Phys.* **71**(1) S133–S139. Cité p. 6, 35
- HYLTON, D. J. (1984). The reduced Dirac-Green function for the Coulomb potential. *J. Math. Phys.* **25** 1125–1132. Cité p. 112, 215
- HYLTON, D. J. and SNYDERMAN, N. J. (1997). Analytic basis set for high- Z atomic QED calculations: Heavy He-like ions. *Physical Review A* **55** 2651–2661. Cité p. 112
- INDELICATO, P. (1988). Multiconfiguration Dirac-Fock Calculations of Transition Energies in Two Electron Ions with $10 \leq Z \leq 92$. *Nucl. Instr. Methods B* **31** 14. Cité p. 23
- INDELICATO, P. (1999). In BEYER and SHEVELKO [1999]. Cité p. 24, 31
- INDELICATO, P., BIRKETT, B. B., BRIAND, J.-P., *et al.* (1992). Hyperfine Quenching and Precision Measurement of the 2^3P_0 – 2^3P_1 Fine Structure Splitting in Heliumlike Gadolinium (Gd^{62+}). *Phys. Rev. Lett.* **68**(9) 1307–1310. Cité p. 20
- INDELICATO, P., BOUCARD, S., and LINDROTH, E. (1998). Relativistic and Many-Body Effects in K, L, and M Shell Ionization Energy for Elements with $10 \leq Z \leq 100$ and the Determination of the $1s$ Lamb Shift for Heavy Elements. *Eur. Phys. J. D* **3**(1) 29–41. Cité p. 8, 24

BIBLIOGRAPHIE

- INDELICATO, P. and DESCLAUX, J.-P. (1990). Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition energies with QED corrections in three-electron ions. *Phys. Rev. A* **42**(9) 5139–5149. Cité p. 23, 31
- INDELICATO, P., GORCEIX, O., and DESCLAUX, J.-P. (1987). Multiconfigurational Dirac-Fock studies of two-electron ions. II. Radiative corrections and comparison with experiment. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 651. Cité p. 23
- INDELICATO, P., GORCEIX, O., TAVERNIER, M., *et al.* (1986). Experimental and Theoretical Study of QED Corrections in the Ground State of Heliumlike Iron. *Zeit. für Phys. D* **2** 149. Cité p. 20
- INDELICATO, P. and LINDROTH, E. (1992). Relativistic Effects, Correlation, and QED Corrections on $K\alpha$ Transitions in Medium to Very Heavy Atoms. *Phys. Rev. A* **46**(5) 2426–2436. Cité p. 24
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (1991). Quantum Electrodynamical Effects in Atomic Structure. *Theor. Chim. Acta* **80** 207–214. Cité p. 29, 31, 160, 215, 243
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (1992). Coordinate-space approach to the one-electron self-energy. *Phys. Rev. A* **46** 172–185. Cité p. 6, 226, 227, 230, 232, 243, 256, 293
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (1995). Asymptotic expansion of the Dirac-Coulomb Green function. *J. Math. Phys.* **36** 714–724. Cité p. 112, 243
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (1998a). 6s and 8d states self-energy for hydrogenlike ions and new results on the self-energy screening. *Hyperfine Interact.* **114** 147–153. Cité p. 29, 160, 228, 232
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (1998b). Coordinate-space approach to the bound-electron self energy: Coulomb field calculation. *Phys. Rev. A* **58** 165–179. Cité p. 6, 111, 226, 227, 230, 231, 232, 243, 256, 292, 293, 294
- INDELICATO, P. and MOHR, P. J. (2001). Coordinate-space approach to the bound-electron self-energy: Self-Energy screening calculation. *Phys. Rev. A* **63**(5) 052507. Cité p. 6, 28, 29, 31, 37, 160, 215, 218, 219, 226, 227, 232, 243, 256, 293
- INDELICATO, P., PARENTE, F., and MARRUS, R. (1989). Effect of the Hyperfine Structure on the 2^3P_1 and the 2^3P_0 Lifetime in Heliumlike Ions. *Phys. Rev. A* **40**(7) 3505–3514. Cité p. 21

- ITZYKSON, C. and ZUBER, J.-B. (1980). *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill. Cité p. 40, 83, 112
- JAUCH, J. M. and ROHRICH, F. (1980). *The Theory of Photons and Electrons*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, second edition. Cité p. 40
- JENTSCHURA, U. (1999). *Quantum Electrodynamical Radiative Corrections in Bound Systems*. Dresdner Forschungen. w.e.b., Dresden. Cité p. 25, 227
- JENTSCHURA, U. and PACHUCKI, K. (1996). Higher-order binding corrections to the Lamb shift of $2P$ states. *Phys. Rev. A* **54**(3) 1853. Cité p. 292
- JENTSCHURA, U. D., MOHR, P. J., and SOFF, G. (1999a). Calculation of the electron self-energy for low nuclear charge. *Phys. Rev. Lett.* **82**(1) 53–56. Cité p. 25, 31, 37, 223, 227
- JENTSCHURA, U. D., MOHR, P. J., and SOFF, G. (2001). Electron self-energy for the K and L shells at low nuclear charge. *Phys. Rev. A* **63** 042512. Cité p. 223, 227, 232, 256
- JENTSCHURA, U. D., MOHR, P. J., SOFF, G., *et al.* (1999b). Convergence acceleration via combined non-linear condensation transformations. *Comput. Phys. Commun.* **116** 28–54. Cité p. 227
- JENTSCHURA, U. D., SOFF, G., and MOHR, P. J. (1997). Lamb shift of $3P$ and $4P$ states and the determination of α . *Phys. Rev. A* **56** 1739. Cité p. 292
- JOHNSON, W. R. and CHENG, K. T. (1984). In *Atomic Inner-Shell Physics*, edited by CRASEMANN, B., pp. 1–47, New York. Plenum. Cité p. 8
- JOHNSON, W. R., MOHR, P. J., and SUCHER, J., editors (1988). *Relativistic, Quantum Electrodynamical, and Weak Interaction Effects in Atoms*, number 189 in AIP conference proceedings, New York. AIP. Cité p. 3
- JOHNSON, W. R., SAPIRSTEIN, J., and CHENG, K. T. (1995). Theory of $2s_{1/2}$ - $2p_{3/2}$ Transitions in Highly Ionized Uranium. *Phys. Rev. A* **51**(1) 297–302. Cité p. 24
- JOHNSON, W. R. and SOFF, G. (1985). *At. Data Nucl. Data Tables* **33** 405. Cité p. 9, 34
- JUNGMANN, K., IVANOV, V. G., and KARSHENBOIM, S. G. (2001). Hyperfine Structure in Muonic Hydrogen. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 446. Cité p. 18, 21, 256

BIBLIOGRAPHIE

- KAHN, S. M. and LIEDAHL, D. A. (1995). X-ray spectroscopy of cosmic sources. In LIESEN [1995], p. 169. Cité p. 8
- KAKU, M. (1993). *Quantum Field Theory — a modern introduction*. Oxford University Press. Cité p. 41, 49, 112
- KÄLLÉN, G. (1952). On the definition of the renormalization constants in quantum electrodynamics. *Helv. Phys. Acta* **25** 417. Cité p. 76, 77
- KÄLLNE, E., KÄLLNE, J., RICHARD, P., *et al.* (1984). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** L115. Cité p. 20
- KARSHENBOIM, S. G. (1999). *Can. J. Phys.* **77** 241. Cité p. 18
- KARSHENBOIM, S. G. (2000). *Can. J. Phys.* **78** 639. Cité p. 9
- KARSHENBOIM, S. G., PAVONE, F. S., BASSANI, F., *et al.*, editors (2001). *The Hydrogen Atom: Precision Physics of Simple Atomic Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer. Cité p. 3, 21, 341, 344, 345, 351, 352, 353, 356, 357, 360, 361
- KATO, T. (1949). On the convergence of the perturbation method. I. *Progr. Theor. Phys.* **IV**(4) 514. Cité p. 76, 94, 122, 124, 125, 127
- KAY, L. (1963). *Phys. Lett.* **5** 36. Cité p. 14
- KELLY, H. P. (1963). Correlation Effects in Atoms. *Phys. Rev.* **131** 684–699. Cité p. 24
- KELLY, H. P. and KIM, Y.-K., editors (1985). *Atomic Theory Workshop on Relativistic and QED Effects in Heavy Atoms*, number 136 in AIP conference proceedings, New York. AIP. Cité p. 345, 358
- KINOSHITA, T. (2001). Present Status of $g - 2$ of Electron and Muon. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 157. Cité p. 6, 35
- KNAPP, D. A. (1995). The uses of electron beam ion traps in the study of highly charged ions. In LIESEN [1995], p. 143. Cité p. 15
- KOROBV, V. and YELKHOVSKY, A. (2001). Ionization Potential of the Helium Atom. *Phys. Rev. Lett.* **87**(19) 193003. Cité p. 36
- KOROBV, V. I. and KOROBV, S. V. (1999). Bethe logarithm for the 1^1S and 2^1S states of helium. *Phys. Rev. A* **59** 3394–3396. Cité p. 26
- KPONOU, A., HUGHES, V. W., JOHNSON, C. E., *et al.* (1971). Precise Measurement of the $2^3P_0-2^3P_1$ Fine-Structure Interval of Helium. *Phys. Rev. Lett.* **26** 1613. Cité p. 19

- KPONOU, A., HUGHES, V. W., JOHNSON, C. E., *et al.* (1981). Experiments on the 2^3P state of helium. III. Measurement of the 2^3P_0 - 2^3P_1 fine-structure interval. *Phys. Rev. A* **24** 264–278. Cité p. 19
- KROLL, N. N. and LAMB, W. E. (1949). *Phys. Rev.* **75** 338. Cité p. 13
- KUHN, H. G. (1969). *Atomic spectra*. Academic Press, New York, second edition. Cité p. 22
- KUSH, P. and FOLEY, H. M. (1947). *Phys. Rev.* **72** 1256. Cité p. 13
- LABZOWSKY, L., GOIDENKO, I., TOKMAN, M., *et al.* (1999). Calculated self-energy contributions for an ns valence electron using the multiple-commutator method. *Phys. Rev. A* **59** 2707–2711. Cité p. 232
- LABZOWSKY, L., KLIMCHITSKAYA, G., and DMITRIEV, Y. (1993). *Relativistic Effects in Spectra of Atomic Systems*. IOP Publishing, Bristol. Cité p. 58
- LAMB, JR, W. E. and RETHERFORD, R. C. (1947). *Phys. Rev.* **72** 241. Cité p. 3, 9, 13, 16, 22
- LE BIGOT, É.-O. and INDELICATO, P. (2001). Atomic energy levels with QED and contribution of the screened self-energy. In CANTATORE [2001], pp. 152–157. Cité p. 60
- LE BIGOT, E.-O., INDELICATO, P., and MOHR, P. J. (2001a). QED self-energy contribution to highly-excited atomic states. *Phys. Rev. A* **64**(5) 052508. Cité p. 28, 31, 37, 112, 222, 232, 237, 238, 255, 258, 260
- LE BIGOT, E.-O., INDELICATO, P., and SHABAEV, V. M. (2001b). Contribution of the screened self-energy to the Lamb shift of quasidegenerate states. *Phys. Rev. A* **63** 040501(R). Cité p. 30, 31, 36, 60, 106, 107, 120, 159, 160, 162, 177, 184, 189, 213, 215, 216, 218
- LE BIGOT, É.-O., INDELICATO, P., and SHABAEV, V. M. (2001c). The two-time Green's Function and screened Self-Energy for two-electron quasidegenerate States. In KARSHENBOIM *et al.* [2001]. Cité p. 36, 60
- LEHMANN, J. (1954). Über Eigenschaften von Ausbreitungsfunktionen und Renormierungskonstanten quantisierter Felder. *Nuovo Cimento* **11** 342. Cité p. 76, 77
- LENZ, S., BORCHERT, G., GORKE, H., *et al.* (1998). A New Determination of the Mass of the Charged Pion. *Phys. Lett. B* **416**(1) 50–55. Cité p. 21
- LEPAGE, G. P. (1977). Analytic bound-state solutions in a relativistic two-body formalism with application to muonium and positronium. *Phys. Rev. A* **16**(3) 863–876. Cité p. 122, 124, 125

BIBLIOGRAPHIE

- LEVINE, M. A., MARRS, R. E., BARDSLEY, J. N., *et al.* (1989). *Nucl. Instr. Methods B* **43** 347–358. Cité p. 15
- LICHTEN, W., SHINER, D., and ZHOU, Z.-X. (1991). Measurement of the Lamb shifts in singlet levels of atomic helium. *Phys. Rev. A* **43** 1663–1665. Cité p. 159
- LIESEN, D., editor (1995). *Physics with Multiply Charged Ions*, volume 348 of *NATO ASI Series B: Physics*. Plenum Press. Cité p. 3, 340, 351, 352
- LINDGREN, I. (1985). *Phys. Rev. A* **31** 1273. Cité p. 23
- LINDGREN, I. (2000). Can MBPT and QED be merged in a systematic way? *Mol. Phys.* **98** 1159–1174. Cité p. 27, 31, 36, 59, 96, 258, 259
- LINDGREN, I., ÅSÉN, B., SALOMONSON, S., *et al.* (2001). QED procedure applied to the quasidegenerate fine-structure levels of He-like ions. *Phys. Rev. A* **64** 062505. Cité p. 27, 29, 30, 31, 36, 59, 160, 219, 258, 259
- LINDGREN, I. and MORRISON, J. (1986). *Atomic many-body theory*. Springer Series on Atoms and Plasmas. Springer-Verlag, second edition. Cité p. 23, 58
- LINDGREN, I., PERSSON, H., SALOMONSON, S., *et al.* (1993a). Second-order QED corrections for few-electron heavy ions: reducible Breit-Coulomb correction and mixed self-energy-vacuum polarization correction. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** L503–L509. Cité p. 29, 160
- LINDGREN, I., PERSSON, H., SALOMONSON, S., *et al.* (1995). Full QED calculations of two-photon exchange for heliumlike systems: Analysis in the Coulomb and Feynman gauge. *Phys. Rev. A* **51** 1167–1195. Cité p. 29, 59, 160
- LINDGREN, I., PERSSON, H., SALOMONSON, S., *et al.* (1993b). Bound-state self-energy calculation using partial-wave renormalization. *Phys. Rev. A* **47** R4555–R4558. Cité p. 31
- LINDROTH, E., DANARED, H., GLANS, P., *et al.* (2001). QED Effects in Cu-Like Pb Recombination Resonances near Threshold. *Phys. Rev. Lett.* **86**(22) 5027–5030. Cité p. 16, 23
- LOGUNOV, A. A. and TAVKHELIDZE, A. N. (1963). Quasi-optical approach in quantum field theory. *Nuovo Cimento* **XXIX**(2) 380. Cité p. 66, 75, 77
- MALLAMPALLI, S. and SAPIRSTEIN, J. (1998). Perturbed orbital contribution to the two-loop Lamb-shift in hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* **80** 5297–5300. Cité p. 26, 28

- MANN, J. B. and JOHNSON, W. R. (1971). Breit Interaction in Multielectron Atoms. *Phys. Rev. A* **4**(1) 41–50. Cité p. 23
- MARIN, F., MINARDI, F., PAVONE, F. S., *et al.* (1994). Precision measurement of the isotope shift of the 2^3S_1 3^3P_0 transition in helium. *Phys. Rev. A* **49** R1523–R1526. Cité p. 159
- MARRS, R. E., ELLIOTT, S. R., and STÖHLKER, T. (1995). Measurement of two-electron contributions to the ground-state energy of heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **52** 3577. Cité p. 15, 20
- MARRUS, R., editor (1983). volume B96 of *NATO ASI series*, New York. Plenum. Cité p. 3, 8, 344, 354
- MARRUS, R., SIMIONOVICI, A., INDELICATO, P., *et al.* (1989). Measurement of the $(1s)(2p_{1/2}) 2^3P_0$ – $(1s)(2p_{1/2})2^3P_1$ Fine-Structure Splitting in Heliumlike Ag^{45+} . *Phys. Rev. Lett.* **63**(5) 502–504. Cité p. 20
- MARTINSON, I. (1983). Experimental investigations of the structure of highly ionized atoms. In MARRUS [1983], p. 1. Cité p. 14
- MARTINSON, I., CURTIS, L. J., and LINDGÅRD, A. (1977). Measurements of Atomic Transition Probabilities in Highly Ionized Atoms by Fast Ion Beams. In *Proceedings of the Culham Conference on Atomic and Molecular Data for Fusion*, volume IAEA-199, pp. 377–404, Vienna. International Atomic Energy Agency. Cité p. 14
- MATHEWS, J. and WALKER, R. L. (1970). *Mathematical methods of physics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., second edition. Cité p. 246
- MELNIKOV, K. and VAN RITBERGEN, T. (2000). *Phys. Rev. Lett.* **84** 1673. Cité p. 25
- MESSIAH, A. (1964). *Mécanique Quantique*, volume 2. Dunod, Paris. Cité p. 27, 30, 90, 94, 122, 124, 125
- MICHELSON, A. A. and MORLEY, E. E. (1887). *Phil. Mag.* **24**(5) 463. Cité p. 10
- MIGDAL, A. B. (1983). *Theory of finite fermi systems and properties of atomic nuclei*. Nauka, Moscow. Cité p. 77
- MINARDI, F., BIANCHINI, G., CANCIO PASTOR, P., *et al.* (1999). Measurement of the Helium 2^3P_0 – 2^3P_1 Fine Structure Interval. *Phys. Rev. Lett.* **82** 1112–1115. Cité p. 19, 159
- MOHR, P. J. (1973). *Radiative corrections in hydrogen-like systems*. PhD thesis, University of California, Berkeley. Cité p. 244

BIBLIOGRAPHIE

- MOHR, P. J. (1974a). Numerical Evaluation of the $1S_{1/2}$ state Radiative Level Shift. *Ann. Phys. (NY)* **88** 52. Cité p. 6, 25, 28, 37, 112, 227, 228, 231, 243, 256
- MOHR, P. J. (1974b). Self-Energy Radiative Corrections in Hydrogen-like Systems. *Ann. Phys. (NY)* **88** 26. Cité p. 22, 28, 37, 111, 225, 226, 227, 228, 229, 231, 239, 240, 255, 259, 265
- MOHR, P. J. (1982). Self-energy of the $n = 2$ states in a strong Coulomb field. *Phys. Rev. A* **26**(5) 2338. Cité p. 228, 230, 240, 243
- MOHR, P. J. (1985). Quantum electrodynamics of high- Z few-electron atoms. *Phys. Rev. A* **32** 1949–1957. Cité p. 27, 47, 59, 86, 111, 217, 284
- MOHR, P. J. (1989). Quantum electrodynamics of high- Z few-electron atoms. In *Physics of Highly-ionized Atoms*, edited by MARRUS, R., pp. 111–141. Plenum, New York. Cité p. 59, 88, 111, 113
- MOHR, P. J. (1993). *Phys. Scr.* **T46** 44. Cité p. 31
- MOHR, P. J. (1996). *Tests of Fundamental Physics*, chapter 28, p. 341. In DRAKE [1996a]. Cité p. 34
- MOHR, P. J. and KIM, Y.-K. (1992). Self-energy of excited states in a strong Coulomb field. *Phys. Rev. A* **45**(5) 2727. Cité p. 6, 228, 230, 237, 240, 243, 256
- MOHR, P. J., PLUNIEN, G., and SOFF, G. (1998). QED corrections in heavy atoms. *Phys. Rep.* **293**(5–6) 227–372. Cité p. 3, 8, 20, 26, 27, 29, 34, 40, 41, 48, 49, 51, 55, 58, 59, 86, 87, 88, 91, 112, 217, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 231, 252
- MOHR, P. J. and SAPIRSTEIN, J. (2000). Evaluation of two-photon exchange graphs for excited states of highly charged heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **62** 052501. Cité p. 29, 30, 160, 219
- MOHR, P. J. and SOFF, G. (1993). Nuclear Size Correction to the Electron Self-Energy. *Phys. Rev. Lett.* **70** 158–161. Cité p. 34
- MOHR, P. J. and TAYLOR, B. N. (2000). CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 1998. *Rev. Mod. Phys.* **72**(2) 351–495. Cité p. 6, 9, 19, 26, 35, 37, 238, 260, 292
- MOHR, P. J. and TAYLOR, B. N. (2001). Fundamental Constants and the Hydrogen Atom. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], pp. 145–156. Cité p. 6, 260

- MUNGER, C. T. and GOULD, H. (1986). Lamb Shift in Heliumlike Uranium (U^{90+}). *Phys. Rev. Lett.* **57**(23) 2927–2930. Cité p. 14
- MYERS, E. G. (2001). Laser Spectroscopy of Hydrogen-Like and Helium-Like Ions. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 179. Cité p. 14
- MYERS, E. G., MARGOLIS, H. S., THOMPSON, J. K., *et al.* (1999). Precision Measurement of the $1s2p\ ^3P_2$ - 3P_1 Fine Structure Interval in Heliumlike Fluorine. *Phys. Rev. Lett.* **82** 4200–4203. Cité p. 21, 159
- MYERS, E. G. and TARBUTT, M. R. (2000). Measurement of the $1s2p\ ^3P_0$ 3P_1 fine-structure interval in heliumlike magnesium. *Phys. Rev. A* **61** 010501(R). Cité p. 21, 159
- NAFE, J. E., NELSON, E. B., and RABI, I. I. (1947). *Phys. Rev.* **71** 914. Cité p. 13
- NAGEL, D. E., JULIAN, R. S., and ZACHARIAS, J. R. (1947). *Phys. Rev.* **72** 973. Cité p. 13
- NIERING, M., HOLZWARTH, R., REICHERT, J., *et al.* (2000). Measurement of the Hydrogen $1S$ - $2S$ Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a Microwave Cesium Fountain Clock. *Phys. Rev. Lett.* **84** 5496–5499. Cité p. 7, 17
- OPPENHEIMER, J. R. (1930). *Phys. Rev.* **35** 461. Cité p. 12
- PACHUCKI, K. (1992). Analytical evaluation of higher-order binding corrections to the Lamb shift. *Phys. Rev. A* **46** 648–651. Cité p. 292
- PACHUCKI, K. (1993). Higher-Order Binding Corrections to the Lamb shift. *Ann. Phys. (NY)* **226** 1–87. Cité p. 292
- PACHUCKI, K. (1999). Quantum electrodynamics effects on helium fine structure. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32**(1) 137–152. Cité p. 26
- PACHUCKI, K. (2001). Logarithmic two-loop corrections to the Lamb shift in hydrogen. *Phys. Rev. A* **63** 042503. Cité p. 26, 223
- PACHUCKI, K. and KARSHENBOIM, S. G. (1998). Complete results for positronium energy levels at order $m\alpha^6$. *Phys. Rev. Lett.* **80** 2101–2104. Cité p. 25
- PASTERNAK, S. (1938). *Phys. Rev.* **54** 1113. Cité p. 12
- PERSSON, H., LINDGREN, I., and SALOMONSON, S. (1993). A new approach to the electron self energy calculation. *Phys. Scr.* **T46** 125–131. Cité p. 31, 226

BIBLIOGRAPHIE

- PERSSON, H., SALOMONSON, S., SUNNERGREN, P., *et al.* (1996). Two-electron Lamb-shift calculations on heliumlike ions. *Phys. Rev. Lett.* **76** 204–207. Cité p. 28, 29, 30, 34, 160, 218
- PERSSON, H., SALOMONSON, S., SUNNERGREN, P., *et al.* (1997). A theoretical survey of QED tests in highly charged ions. *Hyperfine Interact.* **108**(1–3) 3–17. Cité p. 29, 34
- PESKIN, M. E. and SCHROEDER, D. V. (1995). *An introduction to quantum field theory*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts. Cité p. 3, 40, 41, 42, 45, 48, 50, 67, 68, 69, 76, 77, 79, 86, 110, 116, 264
- PLANTE, D. R., JOHNSON, W. R., and SAPIRSTEIN, J. (1994). *Phys. Rev. A* **49** 3519. Cité p. 30
- POHL, R., BIRABEN, F., CONDE, C. A. N., *et al.* (2001). Towards a Measurement of He Lamb Shift in Muonic Hydrogen. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 454. Cité p. 18, 21, 37, 256
- PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A., *et al.* (1993). *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2 edition. Cité p. 292
- QUINEY, H. M. and GRANT, I. P. (1994). Atomic self-energy calculations using partial-wave mass renormalization. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L299–L304. Cité p. 226
- RAMSEY, N. F. (2001). Foreword. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. V. Cité p. 18
- ROCHEV, V. E. (2000). On nonperturbative calculations in quantum electrodynamics. *J. Phys. A* **33** 7379–7406. Cité p. 260
- ROSE, M. E. (1961). *Relativistic electron theory*. John Wiley & Sons, New York. Cité p. 22, 23, 30, 224
- SANSONETTI, C. J., GILLASPY, J. D., and CROMER, C. L. (1990). Precise Experimental Test of Calculated Two-Electron Lamb Shifts in Helium. *Phys. Rev. Lett.* **65** 2539–2542. Cité p. 159
- SAPIRSTEIN, J. (1998). Theoretical Methods for the Relativistic Atomic Many-Body Problem. *Rev. Mod. Phys.* **70**(1) 55–76. Cité p. 24, 58
- SAPIRSTEIN, J. R. (1985). Recent and future progress in quantum electrodynamics. In KELLY and KIM [1985], p. 100. Cité p. 3
- SAPIRSTEIN, J. R. and YENNIE, D. R. (1990). Theory of hydrogenic bound states. In *Quantum Electrodynamics*, edited by KINOSHITA, T., pp. 560–672. World Scientific, Singapore. Cité p. 40, 238

- SCHNEIDER, D. H. G., STEIGER, J., SCHENKEL, T., *et al.* (1999). Physics at the Electron Beam Ion Trap. In BEYER and SHEVELKO [1999], p. 30. Cité p. 15
- SCHRÖDINGER, E. (1926a). *Ann. der Phys.* **79** 361. Cité p. 11
- SCHRÖDINGER, E. (1926b). *Ann. der Phys.* **79** 489. Cité p. 11
- SCHRÖDINGER, E. (1926c). *Ann. der Phys.* **79** 734. Cité p. 11
- SCHRÖDINGER, E. (1926d). *Phys. Rev.* **28** 1049. Cité p. 11
- SCHWARTZ, C. (1961). *Phys. Rev.* **123** 1700. Cité p. 26
- SCHWEBER, S. S. (1961). *An introduction to relativistic quantum field theory*. Harper & Row, and John Weatherhill, Inc. Cité p. 22, 51, 67, 77, 85, 86, 264, 265
- SCHWEPPE, J., BELKACEM, A., BLUMENFELD, L., *et al.* (1991). Measurement of the Lamb Shift in Lithiumlike Uranium (U^{89+}). *Phys. Rev. Lett.* **66** 1434–1437. Cité p. 20
- SCHWINGER, J. (1948). *Phys. Rev.* **73** 416. Cité p. 13
- SCHWINGER, J. (1949). *Phys. Rev.* **75** 898. Cité p. 13
- SCHWINGER, J. (1954a). *Phys. Rev.* **93** 615. Cité p. 8
- SCHWINGER, J. (1954b). *Phys. Rev.* **94** 1362. Cité p. 8
- SCHWINGER, J., editor (1958). *Quantum Electrodynamics*. Dover Publications, Inc., New York. Cité p. 13
- SCHWINGER, J. (1983). In *The Birth of Particle Physics*, edited by BROWN, L. and HODDESON, L., p. 336. Cambridge University Press, Cambridge. Cité p. 12
- SCHWOB, C., JOZEFOWSKI, L., DE BEAUVOIR, B., *et al.* (1999). Optical Frequency Measurement of the $2S - 12D$ Transitions in Hydrogen and Deuterium: Rydberg Constant and Lamb Shift Determinations. *Phys. Rev. Lett.* **82** 4960–4963. Cité p. 17, 223
- SERIES, G. W. (1989). The Hydrogen Atom (An Historical Account of Studies of Its Spectrum). In *The Hydrogen Atom*, edited by BASSANI, G. F., INGUSCIO, M., and HÄNSCH, T. W., p. 2, Berlin, Heidelberg. Springer. Cité p. 10
- SEWTZ, M. (2001). Cité p. 222

BIBLIOGRAPHIE

- SHABAEV, V. M. (1988a). Nuclear recoil effect in the relativistic theory of multiply charged ions. *Sov. J. Nucl. Phys.* **47**(1) 69–72. Cité p. 40, 60
- SHABAEV, V. M. (1988b). Quantum-electrodynamical perturbation theory in the Rayleigh-Schrödinger form for the calculation of the energy levels of atomic systems. In *Many-particle effects in atoms*, edited by SAFRONOVA, U. I., pp. 16–23. AN SSSR, Nauchnyi Sovet po Spectroskopii, Moscow. Cité p. 5, 27, 36, 60, 73, 83, 91, 116, 159
- SHABAEV, V. M. (1988c). Quantum-electrodynamical perturbation theory in the Rayleigh-Schrödinger form for the calculation of transition probabilities and cross-sections of various processes. In *Many-particle effects in atoms*, edited by SAFRONOVA, U. I., pp. 24–33. AN SSSR, Nauchnyi Sovet po Spectroskopii, Moscow. Cité p. 60
- SHABAEV, V. M. (1990a). Quantum electrodynamic theory of multiply charged ions. *Sov. Phys. J.* **33**(8) 660–670. Cité p. 5, 27, 31, 36, 58, 60, 73, 83, 90, 91, 92, 104, 116, 160, 258, 261, 264, 279
- SHABAEV, V. M. (1990b). Rayleigh-Schrödinger perturbation theory for a relativistic atom. *Theor. Math. Phys.* **82**(1) 83–89. Cité p. 60, 67, 68, 116
- SHABAEV, V. M. (1991). Quantum electrodynamic theory for the natural shape of the spectral line. *J. Phys. A* **24** 5665–5674. Cité p. 60
- SHABAEV, V. M. (1993). Schrödinger-like equation for the relativistic few-electron atom. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 4703–4718. Cité p. 5, 75, 94, 95, 97, 99, 100, 101, 106, 107, 122, 123, 124, 164
- SHABAEV, V. M. (1994). Quantum electrodynamic theory of recombination of an electron with a highly charged ion. *Phys. Rev. A* **50**(6) 4521–4534. Cité p. 5, 9, 60, 69, 73, 79, 81, 89, 91, 104, 261
- SHABAEV, V. M. (1998). QED theory of the nuclear recoil effect in atoms. *Phys. Rev. A* **57**(1) 59. Cité p. 34, 40, 60
- SHABAEV, V. M. (2000). Two-time Green function method in quantum electrodynamics of high- Z few-electron atoms. arXiv:physics/0009018. Cité p. 9, 65, 71, 75, 77, 79, 80, 81, 83, 86, 91, 92, 104, 127, 132, 134, 139, 140, 156, 189, 261, 264, 279, 287, 289
- SHABAEV, V. M. (2001). Relativistic Recoil Corrections to the Atomic Energy Levels. In KARSHENBOIM *et al.* [2001], p. 714. Cité p. 34
- SHABAEV, V. M. (2002). Two-time Green's function method in quantum electrodynamics of high- Z few-electron atoms. *Phys. Rep.* **356** 119–228. Cité p. 9, 65, 71, 75, 77, 79, 80, 81, 83, 86, 91, 92, 104, 132, 134, 139, 140, 156, 181, 261, 264, 279, 287, 289

- SHABAEV, V. M. and FOKEEVA, I. G. (1994). Calculation formulas for the reducible part of the two-photon-exchange diagrams in the QED of multicharged ions. *Phys. Rev. A* **49** 4489–4501. Cité p. 59, 65, 69, 70, 92, 95, 113, 120, 122, 124, 156, 204
- SHINER, D., DIXSON, R., and ZHAO, P. (1994). Precise measurement of the Lamb shift and fine structure of the $2S$ – $2P$ transition in triplet helium. *Phys. Rev. Lett.* **72** 1802–1805. Cité p. 19
- SIMON, G. G., CH. SCHMITT, BORKOWSKI, F., *et al.* (1980). *Nucl. Phys. A* **333** 381. Cité p. 18
- SIMONS, L. (1998). Measurement of the strong interaction width and shift of the ground state of pionic hydrogen. Proposal R-88-01.1, PSI. Cité p. 15
- SNYDERMAN, N. J. (1991). Electron Radiatives Self-Energy of Highly Stripped Heavy Atoms. *Ann. Phys. (N. Y.)* **211** 43–86. Cité p. 226
- SOFF, G. and MOHR, P. J. (1988). Vacuum polarization in a strong external field. *Phys. Rev. A* **38** 5066–5075. Cité p. 8, 34
- SOMMERFELD, A. (1916). *Ann. der Phys.* **51** 1. Cité p. 10
- STAUDE, U., BOSSELMANN, P., BÜTTNER, R., *et al.* (1998). Measurements of $2s^2S_{1/2}$ – $2p^2P_{3/2,1/2}$ transition energies in lithiumlike heavy ions: Experiments and results for Ni^{25+} and Zn^{27+} . *Phys. Rev. A* **58** 3516. Cité p. 20
- STERMAN, G. (1993). *An introduction to quantum field theory*. Cambridge University Press. Cité p. 77, 135, 137, 279
- STÖHLKER, T., ELLIOTT, S. R., and MARRS, R. E. (1996). *Hyperfine Interact.* **99** 217. Cité p. 21
- STÖHLKER, T., MOKLER, P. H., BECKERT, K., *et al.* (1993). Ground-State Lamb Shift for Hydrogenlike Uranium Measured at the ESR Storage Ring. *Phys. Rev. Lett.* **71** 2184. Cité p. 20, 21
- STÖHLKER, T., MOKLER, P. H., BOSCH, F., *et al.* (2000). $1s$ Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium Measured on Cooled, Decelerated Ion Beams. *Phys. Rev. Lett.* **85**(15) 3109–3112. Cité p. 3, 14
- STORRY, C. H., GEORGE, M. C., and HESSELS, E. A. (2000). Precision Microwave Measurement of the 2^3P_1 – 2^3P_2 Interval in Atomic Helium. *Phys. Rev. Lett.* **84** 3274–3277. Cité p. 19, 159

BIBLIOGRAPHIE

- STORRY, C. H. and HESSELS, E. A. (1998). Precision microwave measurement of the 2^3P_1 – 2^3P_0 interval in atomic helium. *Phys. Rev. A* **58** R8–R11. Cité p. 159
- SUCHER, J. (1957). *S*-Matrix Formalism for Level-Shift Calculations. *Phys. Rev.* **107**(5) 1448–1449. Cité p. 27, 58, 65
- SUCHER, J. (1980). Foundation of the relativistic theory of many-electron atoms. *Phys. Rev. A* **22** 348–362. Cité p. 57
- SUNNERGREN, P. (1998). *Complete One-Loop QED Calculations for Few-Electron Ions*. PhD thesis, Göteborg University, Chalmers University of Technology. Cité p. 58, 160
- TAVERNIER, M., BRIAND, J.-P., INDELICATO, P., *et al.* (1985). Measurement of the $1s$ Lamb Shift of Hydrogenlike Krypton. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** L327. Cité p. 20
- TELLER, P. (1995). *An interpretive introduction to quantum field theory*. Princeton University Press. Cité p. 66
- THOMPSON, W. J. (1994). *Angular Momentum: An Illustrated Guide to Rotational Symmetries for Physical Systems*. Wiley–Interscience. Cité p. 245, 253
- THOULESS, D. J. (1961). *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems*. Academic Press, New York. Cité p. 77
- UDEM, T., REICHERT, J., HOLZWARTH, R., *et al.* (2001). A New Type of Frequency Chain and Its Application to Fundamental Frequency Metrology. In KARSHENBOIM *et al.* [2001]. Cité p. 7, 18
- UHLENBECK, G. E. and GOUDSMIT, S. (1925). *Naturwiss.* **13** 953. Cité p. 11
- UHLENBECK, G. E. and GOUDSMIT, S. (1926). *Nature* **117** 264. Cité p. 11
- UTTER, S. B., BEIERSDORFER, P., and BROWN, G. V. (2000). Measurement of an unusual $M1$ transition in the ground state of Ti-like W^{52+} . *Phys. Rev. A* **61** 030503. Cité p. 223
- VAN DER WAERDEN, V. L., editor (1968). *Sources of Quantum Mechanics*. Dover Publications, Inc., New York. Cité p. 11
- WALLER, I. (1930a). *Z. f. Phys.* **59** 168. Cité p. 12
- WALLER, I. (1930b). *Z. f. Phys.* **61** 721. Cité p. 12
- WALLER, I. (1930c). *Z. f. Phys.* **62** 673. Cité p. 12

- WATANABE, H., CROSBY, D., CURRELL, F. J., *et al.* (2001). Magnetic dipole transitions in titaniumlike ions. *Phys. Rev. A* **63** 042513. Cité p. 223
- WEBB, J. K., MURPHY, M. T., FLAMBAUM, V. V., *et al.* (2001). Further Evidence for Cosmological Evolution of the Fine Structure Constant. *Phys. Rev. Lett.* **87**(9) 091301. Cité p. 9
- WEINBERG, S. (1995). *The Quantum Theory of Fields: Foundations*. Cambridge University Press, Cambridge. Cité p. 3, 10, 11, 12, 41, 77
- WEITZ, M., HUBER, A., SCHMIDT-KALER, F., *et al.* (1995). Precision measurement of the 1S ground-state Lamb shift in atomic hydrogen and deuterium by frequency comparison. *Phys. Rev. A* **52** 2664–2681. Cité p. 223
- WHITE, H. E. (1934). *Introduction to atomic spectra*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill book company. Cité p. 10, 11
- WICHMANN, E. H. and KROLL, N. M. (1956). Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field. *Phys. Rev.* **101** 843. Cité p. 32, 74, 112, 226
- WICK, G. C. (1950). *Phys. Rev.* **80** 268. Cité p. 67, 85, 110, 264, 265
- WILLIAMS, R. C. (1938). *Phys. Rev.* **54** 558. Cité p. 12
- WOLLASTON, W. H. (1802). *Phil. Trans. R. Soc.* **II** 365. Cité p. 10
- WOOD, II, O. R., PATEL, C. K. N., MURNICK, D. E., *et al.* (1982). Measurement of the Lamb Shift in Hydrogenic Cl^{16+} . *Phys. Rev. Lett.* **48** 398. Cité p. 14
- XIE, Z. Q. (1998). *Rev. Sci. Instrum.* **63** 2. Cité p. 15
- YENNIE, D. R. (1989). A Perturbative Approach to Many-Electron Energy Levels. In *Relativistic, quantum electrodynamic, and weak interaction effects in atoms*, edited by JOHNSON, W., MOHR, P., and SUCHER, J., volume 189 of *AIP conference proceedings*. AIP. Cité p. 58, 66, 97, 274
- YEROKHIN, V. A. (2000). Loop-after-loop contribution to the second-order Lamb shift in hydrogenlike low- Z atoms. *Phys. Rev. A* **62** 012508. Cité p. 26, 28, 29, 32, 167
- YEROKHIN, V. A. (2001). Leading Logarithmic Contribution to the Second-Order Lamb Shift Induced by the Loop-After-Loop Diagram. *Phys. Rev. Lett.* **86** 1990–1993. Cité p. 26
- YEROKHIN, V. A., ARTEMYEV, A. N., BEIER, T., *et al.* (1999a). Two-electron self-energy corrections to the $2p_{1/2}$ - $2s$ transition energy in Li-like ions. *Phys. Rev. A* **60**(5) 3522–3540. Cité p. 120, 160, 204

BIBLIOGRAPHIE

- YEROKHIN, V. A., ARTEMYEV, A. N., BEIER, T., *et al.* (1998). Direct evaluation of the two-electron self-energy corrections to the ground state energy of lithium-like ions. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L691–L697. Cité p. 31, 160
- YEROKHIN, V. A., ARTEMYEV, A. N., BEIER, T., *et al.* (1999b). Calculation of the Screened Self-Energy and Vacuum-Polarization Corrections in High- Z Lithium-Like Ions. *Phys. Scr.* **T80** 495–497. Cité p. 31
- YEROKHIN, V. A., ARTEMYEV, A. N., and SHABAEV, V. M. (1997). Two-electron self-energy contribution to the ground-state energy of helium-like ions. *Phys. Lett. A* **234** 361–366. Cité p. 29, 34, 160
- YEROKHIN, V. A., ARTEMYEV, A. N., SHABAEV, V. M., *et al.* (2000). Two-photon exchange corrections to the $2p_{1/2} - 2s$ transition energy in Li-like high- Z ions. *Phys. Rev. Lett.* **85** 4699. Cité p. 5, 160
- YEROKHIN, V. A. and SHABAEV, V. M. (1995). Accurate calculation of self-energy screening diagrams for high Z heliumlike atoms. *Phys. Lett. A* **207** 274–280. Cité p. 29, 60
- YEROKHIN, V. A. and SHABAEV, V. M. (1996a). *Phys. Lett. A* **210** 437. Cité p. 29
- YEROKHIN, V. A. and SHABAEV, V. M. (1996b). Contribution of the diagrams of screened self-energy to the Lamb shift of the ground state of a two-electron multiply-charged ion. *JETP* **83**(1) 39–49. Cité p. 29, 59, 120
- YEROKHIN, V. A. and SHABAEV, V. M. (1999). First-order self-energy correction in hydrogenlike systems. *Phys. Rev. A* **60**(2) 800–811. Cité p. 226, 232
- YNNERMAN, A., JAMES, J., LINDGREN, I., *et al.* (1994). Many-body calculation of the $2p_{1/2,3/2} - 2s_{1/2}$ transition energies in Li-like ^{238}U . *Phys. Rev. A* **50** 4671–4677. Cité p. 59
- ZHANG, T. (1996). Corrections to $O(\alpha^7(\ln\alpha)mc^2)$ fine-structure splittings and $O(\alpha^6(\ln\alpha)mc^2)$ energy levels in helium. *Phys. Rev. A* **54** 1252–1312. Cité p. 26
- ZHANG, T. and DRAKE, G. W. F. (1996). Corrections to $O(\alpha^7mc^2)$ fine-structure splittings in helium. *Phys. Rev. A* **54** 4882–4922. Cité p. 26
- ZHANG, T., YAN, Z.-C., and DRAKE, G. W. F. (1996). QED Corrections of $O(mc^2\alpha^7\ln\alpha)$ to the Fine Structure Splittings of Helium and He-like Ions. *Phys. Rev. Lett.* **77** 1715–1718. Cité p. 26, 88

Index

- $(-1)^{PP'}$, voir Signature d'une permutation
- $|0\rangle$, voir Vide sans interactions
- \hat{a} , voir Opérateur d'annihilation
- \hat{A} , voir Champ quantique de photons
- $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}(l_{\min})$, 243
- A_{60} , 293
- \hat{a}^\dagger , voir Opérateur de création
- Adjoint de Dirac, 50, 51
- $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$, voir Coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$
- α , 42
- α , 9, 19, 20, 26
définition, 22
- \hat{b} , voir Opérateur d'annihilation
- b , voir Énergie b
- Base duale des vecteurs de recouvrement, 99
- \hat{b}^\dagger , 46
- β , 42
- C_H , voir Contour haute énergie
- Champ quantique de Dirac, 46
en représentation
d'interaction, 48
de Heisenberg, 66
de Schrödinger, 55
- Champ quantique de photons, 49
- Charge
de l'électron, 42
élémentaire, 42
- C_L , voir Contour basse énergie
- Coefficient $3j$ de Wigner, 240
- Coefficients angulaires $A_{\kappa, \kappa_n}^{ij}$, 239
- Constante de structure fine, voir α
- Contour
basse énergie, 228
exact, 95, 129
pour une énergie, 82–83
haute énergie, 228
non perturbé, 121, 129
partiel, 172
- Contraction d'un propagateur, 152, 282, 286
- Conventions
indices répétés, 37
opérateurs sur l'espace de Fock, 37
symbole de sommation, 239
unités, 37
- Coordonnée ξ , 68
- Déplacement de masse, 52
- $\Delta E_{\alpha, k}$, voir Énergie modèle (correction)
- $\Delta E_{1, \dots, s}$, voir Énergies quasi-dégénérées (distance aux)
- δm , voir Déplacement de masse
- Déplacement de Lamb
dans l'hélium, 18
dans l'hydrogène, 8, 17
dans l'uranium hydrogénoïde, 14
dans les atomes, 23
diverses contributions (au), 33

- Développement perturbatif
 - de la fonction de Green, 102
 - de la matrice K , 102
 - de la matrice P , 102
 - du hamiltonien effectif, 102, 103
- Diagrammes
 - irréductibles, 181
 - réductibles, 181
- Dirac
 - équation (de), 42
 - matrices (de), voir Matrices de Dirac
 - nombre quantique (de), voir Nombre quantique de Dirac
- $D_{\mu\nu}$, voir Propagateur photonique en temps
- e , voir Charge élémentaire
- $E_{1,\dots,s}^{(0)}$, voir Énergie modèle non perturbée
- \mathcal{E}_H , voir Self énergie (partie haute énergie)
- \mathcal{E}_L , voir Self énergie (partie basse énergie)
- Électrodynamique
 - des états liés, 40
- Électrons d'un état de Fock, 45, 91, 206
- Élément de matrice de la fonction de Green
 - développement, 103
 - définition, 91
 - exact, 92, 97
 - pour un diagramme, 115
- ε_n , voir Énergie de Dirac
- E_n , voir Énergie d'un état de Fock
- $E_{n1,\dots,s}$, voir Énergies quasi-dégénérées exactes
- $E_{n1,\dots,s}^{(0)}$, voir Énergies quasi-dégénérées non perturbées
- Énergie
 - b , 239
 - d'un état de Fock, 72
 - de Dirac, 42
 - de maille, 134
 - modèle
 - correction, 126
 - non perturbée, 126
 - Énergies quasi-dégénérées
 - distance aux, 165
 - exactes, 94, 95, 121
 - non perturbées, 121
 - ε^+ , voir Rotation infinitésimale positive
 - ε^- , voir Rotation infinitésimale négative
 - \mathcal{E}_{SE} , voir Self énergie (déplacement)
 - États propres
 - de Dirac, 42
 - exacts, 72
 - quasi-dégénérés
 - exacts, 95, 121
 - non perturbés, 95, 121
 - F , voir Self énergie réduite
 - Fock
 - espace de, 44
 - Fonction
 - de Bessel sphérique de première espèce, 240, 252
 - distance, 239
 - T , 239
 - Fonction d'onde
 - à N particules, 78, 91, 97
 - Fonction de Green
 - à deux temps, voir Propagateur à deux temps
 - méthode (de la), 60, 63, 119
 - élément de matrice, voir Élément de matrice de la fonction de Green (définition)
 - exacte, 75

- intégrée sur un contour, 165, 168, 172
 pour des énergies complexes, 70
 pour des énergies réelles, 70
 sans interactions, 77
 Fonction méromorphe modèle, 126
- G , voir Propagateur électronique en énergie
 g_α , voir Fonction méromorphe modèle
 Γ , voir Contour exact
 γ^μ , 50
 Γ_0 , voir Contour non perturbé
 $\Gamma_0^{\neq ij}$, voir Contour non perturbé partiel
 Γ_0^i , voir Contour non perturbé partiel
 Γ_0^j , voir Contour non perturbé partiel
 Γ_n , voir Contour exact pour une énergie
 Gell-Mann–Low–Sucher, 58
 \mathcal{G}^N , voir Fonction de Green
 $\mathcal{G}_{(\dots)}^N$, voir Développement perturbatif de la fonction de Green
 $\langle |\mathcal{G}_D^N(E) \otimes^N \gamma^0| \rangle$, voir Élément de matrice de la fonction de Green pour un diagramme
 $\langle |\mathcal{G}^N(E) \otimes^N \gamma^0| \rangle$, voir Élément de matrice de la fonction de Green
 $\langle |\mathcal{G}_{(\dots)}^N(E) \otimes^N \gamma^0| \rangle$, voir Élément de matrice de la fonction de Green développée
- \hat{H} , voir Hamiltonien de QED en représentation d'interaction
 \hat{H}_0 , voir Hamiltonien de QED non perturbé
 Hamiltonien d'interaction en représentation d'interaction, 51
 de Schrödinger, 53, 55
 Hamiltonien de QED en représentation d'interaction, 49
 non perturbé, 50
 Hamiltonien effectif, 95
 pour un niveau isolé, 162
 Harmoniques sphériques, 246
 H_{eff} , voir Hamiltonien effectif
 $H_{\text{eff}}^{(\dots)}$, voir Développement perturbatif du hamiltonien effectif
 \hat{H}_I^1 , voir Hamiltonien d'interaction en représentation d'interaction
 \hat{H}_S^1 , voir Hamiltonien d'interaction en représentation de Schrödinger
 $H_{\mu\nu}$, voir Propagateur photonique en énergie
- $\langle |I(\dots)| \rangle$, voir Opérateur d'échange de photon
 $i0$, voir Quantité infinitésimale $i0$
 $\mathcal{I}_{ij}^D[f(E)]$, voir Fonction de Green intégrée sur un contour
 $\mathcal{I}_{ij;\gamma}^D[f(E)]$, voir Fonction de Green intégrée sur un contour
 $\mathcal{I}_{ij}^{(k)}[f(E)]$, voir Fonction de Green intégrée sur un contour
- \mathcal{J}_l^2 , 240
 j_l , voir Fonction de Bessel sphérique de première espèce
 \hat{j}^μ , voir Opérateur courant
 K , voir Matrice K

- $K^{(\dots)}$, voir Développement perturbatif de la matrice K
 κ , voir Nombre quantique de Dirac
 κ_n , voir Self énergie (état étudié)
 Ket $| \rangle$, 44
 Ket $| \succ$, 91

 l , voir Nombre quantique de moment cinétique orbital, voir Nombre quantique de moment cinétique total
 $\mathcal{L}(a, b, c)$, 241
 Lamb, voir Déplacement de Lamb
 Landé (facteur de), 9
 Legendre
 fonction associée (de), 246
 polynôme (de), 239
 l_κ , voir Nombre quantique de moment cinétique orbital
 l_{\min} , 242

 Masse de l'électron, 42
 Masse du photon, 81
 Matrice
 K , 95, 99, 128
 P , 96, 99, 128
 Matrices de Dirac, voir α , β et γ^μ
 m_e , voir Masse de l'électron
 μ , voir Masse du photon

 $| \mathbf{n} \rangle$, voir États propres exacts
 $| \mathbf{n}_0 \rangle$, 91
 $| \mathbf{n}'_0 \succ$, voir Fonction d'onde à N particules
 $n_{1, \dots, N}$, voir Électrons d'un état de Fock
 $| \mathbf{n}^{1, \dots, s} \rangle$, voir États propres quasi-dégénérés exacts
 $| \mathbf{n}_0^i \rangle$, voir États propres quasi-dégénérés non perturbés
 Niveaux d'énergie
 de l'hydrogène, 4, 43
 de l'uranium hydrogénoïde, 4
 n_i^j , voir Électrons d'un état de Fock

 Nombre quantique
 de Dirac, 224
 de moment cinétique orbital, 224, 239
 total, 224

 $|\Omega\rangle$, voir Vide avec interaction
 Opérateur
 chronologique, 68
 courant, 51
 d'annihilation, 46
 d'échange de photon, 204
 de création, 46
 de self énergie, 204
 Ordonnancement temporel, 137

 P , voir Permutation P
 P , voir Matrice P
 $P^{(\dots)}$, voir Développement perturbatif de la matrice P
 Particule fantôme, 120, 146–154
 méthode (de la), 131
 Permutation P , 107
 $\varphi_n^{\text{él}}$, voir Fonction d'onde à N particules
 φ_k , voir Vecteur de recouvrement
 ϕ_n , voir États propres de Dirac
 φ_n^{pos} , voir Fonction d'onde à N particules
 $P_n^i(\xi)$, voir Legendre (fonction associée de)
 P_n , voir Legendre (polynôme de)
 Produit chronologique, voir Opérateur chronologique
 Propagateur
 à deux temps, 68, 69
 dépendance en temps, 73
 de Dirac, voir Propagateur électronique
 électronique
 décomposition spectrale, 112
 en énergie, 111
 en temps, 85

- photonique
 décomposition spectrale, 113, 135
 en énergie, 111, 113
 en temps, 86, 112
- $\hat{\psi}$, voir Champ quantique de Dirac en représentation de Schrödinger
- $\widehat{\psi}$, voir Adjoint de Dirac
- $\hat{\psi}_H$, voir Champ quantique de Dirac en représentation de Heisenberg
- $\hat{\psi}_I$, voir Champ quantique de Dirac en représentation d'interaction
- q_e , voir Charge de l'électron
- QED, 41
- Quantité infinitésimale $i0$, 74
- Quasi-dégénérescence, 30
- R_α , voir Fonction méromorphe modèle
- $r_{\alpha,k}$, voir Fonction méromorphe modèle
- Résolvante, 76, 122
- ρ , voir Fonction distance
- Rotation infinitésimale
 négative, 112
 positive, 211
- Self énergie
 déplacement, 225
 écranée, 161
 état étudié, 230
 partie basse énergie, 228
 partie haute énergie, 228
 réduite, 233
 développement, 238
- S_F , voir Propagateur électronique en temps
- $\prec |\Sigma(\dots)| \succ$, voir Opérateur de self énergie
- \sum , voir Conventions (symbole de sommation)
- \sum , voir Sommation sur les états
- Signature d'une permutation, 115
- S_F^N , voir Propagateur à deux temps
- Sommation sur les états, 48
- T , voir Fonction T
- T , voir Opérateur chronologique
- Vecteur de recouvrement, 99
- Vide
 avec interactions, 66
 sans interactions, 44
- v_k , voir Base duale des vecteurs de recouvrement
- x_1, x_2 , voir y_1, y_2
- ξ , voir Coordonnée ξ
- y_1, y_2 , 240
- $Y_{l,m}(\theta, \phi)$, voir Harmoniques sphériques
- Zones de calcul pour $A_{\kappa, \kappa_n}^{12}$, 243

INDEX

Résumé Nous présentons des évaluations théoriques et numériques de contributions de l'électrodynamique quantique (QED) aux niveaux d'énergie des ions à un et deux électrons.

Nous donnons tout d'abord un aperçu des mesures de niveaux d'énergie dans les systèmes simples formés d'un noyau et de quelques électrons (en nous concentrant sur l'hydrogène, les ions hydrogénéoïdes, l'hélium et les ions héliumoïdes, y compris très chargés). De tels niveaux permettent entre autres des mesures très précises de constantes fondamentales (comme par exemple la constante de structure fine α ou le Rydberg).

Nous faisons le point sur une méthode d'évaluation formelle des niveaux d'énergie prédits par QED : la méthode « de la fonction de Green à deux temps », et nous en donnons une présentation très détaillée. Cette méthode permet d'obtenir de QED les énergies de niveaux atomiques, y compris lorsque ceux-ci sont dégénérés ou quasi-dégénérés (dans l'approximation d'électrons ne subissant que l'attraction du noyau) — ce qu'il n'est possible de faire qu'avec une seule autre méthode, très récente. Nous montrons qu'il est possible de résoudre les difficultés de principe que pose la méthode de la fonction de Green à deux temps, grâce à une étude (restreinte au problème considéré) du lien entre les propriétés analytiques d'une fonction méromorphe et de son développement perturbatif. Afin de pouvoir utiliser de façon pratique la méthode de la fonction de Green à deux temps pour l'obtention des niveaux d'énergie prédits par QED, nous introduisons de plus la méthode graphique « de la particule fantôme », qui permet de calculer systématiquement un hamiltonien effectif pour les niveaux considérés. Enfin, nous présentons un calcul détaillé d'une contribution (la « self énergie écrantée ») au hamiltonien effectif, qui montre que la méthode de la particule fantôme peut être appliquée de façon générale à l'évaluation des déplacements en énergie dus à n'importe quel diagramme de Feynman.

Enfin, nous étendons par des formules analytiques la méthode actuellement la plus précise de calcul du déplacement le plus important de QED (la self énergie), dans l'hydrogène et les ions hydrogénéoïdes. Cette méthode numérique permet d'obtenir le déplacement de self énergie de niveaux de moment cinétique quelconque (elle était auparavant restreinte à $j \leq 3/2$). Nous montrons qu'il est ainsi possible de calculer numériquement le déplacement de self énergie de nombreux niveaux excités, avec une très bonne précision.

Mots-clés : niveaux d'énergie, spectroscopie, QED, systèmes simples, ions hydrogénéoïdes, ions héliumoïdes, hydrogène, hélium, fonction de Green à deux temps, hamiltonien effectif, diagrammes de Feynman, self énergie écrantée, self énergie, calculs numériques.

Abstract We present theoretical and numerical evaluations of the contributions of quantum electrodynamics (QED) to the energy levels of one- and two-electron ions.

First, we give an overview of energy level measurements in simple systems composed of a nucleus and a few electrons (especially hydrogen, helium, and hydrogen- and helium-like ions, including highly-charged ions). Such energy levels allow for very precise measurements of some of the fundamental constants (such as the fine structure constant α or the Rydberg constant).

We review results published on a method tailored for the formal evaluation of the atomic energy levels predicted by QED: the “two-time Green’s function method,” that we present in great detail. This method allows one to obtain the atomic energy levels predicted by QED, even when they are degenerate or quasi-degenerate (within the approximation which considers them as sensitive only to the electromagnetic field of the nucleus)—this can only be achieved by one other method, which is very recent. We show that it is possible to solve fundamental problems raised by the two-time Green’s function method, by providing a (partial) study of the relationship between a meromorphic function and its perturbative expansion. In order to enable one to use the two-time Green’s function method in practical calculations of atomic energy levels, we introduce the “phantom particle method,” which allows one to systematically derive an effective hamiltonian for the levels under study. Finally, we present a detailed calculation of the “screened self energy” contribution to the effective hamiltonian, which also shows that the phantom particle method can be applied to the calculation of the energy shift resulting from any Feynman diagram.

Finally, we extend the most precise numerical method of calculation of the self energy shift (the most important QED shift), in hydrogen and hydrogen-like ions. This numerical method allows one to obtain the self energy shift of any level (it was previously restricted to $j \leq 3/2$). We show that it is possible to obtain the self energy shifts of numerous levels in hydrogen-like ions with a high level of accuracy.

Keywords: energy levels, spectroscopy, QED, simple systems, hydrogen-like ions, helium-like ions, hydrogen, helium, two-time Green’s function, effective hamiltonian, Feynman diagrams, screened self energy, self energy, numerical calculations.