



HAL
open science

Calcul de haute précision d'énergies de transitions dans les atomes exotiques et les lithiumoïdes : corrections relativistes, corrections radiatives, structure hyperfine et interaction avec le cortège électronique résiduel

Stéphane Boucard

► To cite this version:

Stéphane Boucard. Calcul de haute précision d'énergies de transitions dans les atomes exotiques et les lithiumoïdes : corrections relativistes, corrections radiatives, structure hyperfine et interaction avec le cortège électronique résiduel. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1998. Français. NNT : . tel-00007148

HAL Id: tel-00007148

<https://theses.hal.science/tel-00007148>

Submitted on 20 Oct 2004

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

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



**LABORATOIRE
KASTLER BROSSSEL**



Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie

Spécialité : Physique Atomique

présentée par

Stéphane BOUCARD

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

Sujet de la Thèse :

**Calcul de haute précision d'énergies de transitions
dans les atomes exotiques et les Lithumoides :
Corrections relativistes, corrections radiatives, structure hyperfine
et interaction avec le cortège électronique résiduel.**

Soutenue le 3 juillet 1998 devant le jury composé de :

M. F. COSTA PARENTE	Rapporteur
M. J-P. DESCLAUX	Rapporteur
M. P. INDELICATO	Directeur de thèse
M. A. MAQUET	
M. R. McCARROLL	

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	13
1. Mécanique Quantique Relativiste	17
1.1 Introduction	17
1.2 Notations	18
1.3 Diagrammes de Feynman	22
1.4 Problèmes Relativistes à Un Corps	24
1.4.1 Équation de Klein-Gordon	25
1.4.2 Équation de Dirac	27
1.4.3 Fonctions d'onde	28
1.5 Interaction Électron-électron	29
1.6 Corrections Radiatives	32
1.6.1 La Self-énergie	33
1.6.2 La Polarisation du Vide	34
2. Calcul relativiste à N-corps : MCDF	37
2.1 Introduction	37
2.2 Hamiltonien Sans Paire	38
2.3 Fonction d'onde	41

2.4	Équations de Dirac Fock	42
2.5	Processus Self-Consistant	42
2.6	Modèle Nucléaire	43
2.7	Polarisation du Vide Self-consistante	44
3.	Structure Hyperfine dans les Lithiumoïdes	49
3.1	Introduction	49
3.2	Calcul de la Structure Hyperfine	51
3.3	Transitions Hyperfines dans les Ions Hydrogéoïdes	53
3.4	Transitions Hyperfines dans les Ions Lithiumoïdes	61
3.4.1	Premier Ordre	61
3.4.2	Corrélations	61
3.4.3	Continuum Négatif	65
3.4.4	Part Non Additive	66
3.4.5	Corrections Radiatives	66
3.5	Discussions	71
4.	Calcul dans les atomes Anti-Protoniques	77
4.1	Introduction	77
4.2	Position du problème	79
4.2.1	Expérience	79
4.2.2	Calcul des Transitions	80
4.3	Calcul du g-2	81
4.3.1	Matrices de Dirac et Spineurs	81
4.3.2	Équation de Dirac du second ordre dans un champ extérieur	83

4.3.3	Équation pour $g-2$	84
4.3.4	Partie Électrique	86
4.3.5	Partie Magnétique	87
4.4	Taille Finie de la Particule	98
4.4.1	Potentiel Electrostatique	98
4.4.2	Calcul du Potentiel d'Interaction	99
4.5	Résultats	103
4.5.1	Énergies de Calibration	103
4.5.2	Structures des Niveaux 2p et 3d de $\bar{p}H$ et $\bar{p}D$	104
5.	Calcul dans les atomes Pioniques	109
5.1	Introduction	109
5.2	Expérience	110
5.3	Calculs des Transitions	111
5.4	Masses du Pion et du Neutrino Muonique	111
6.	Conclusion et Perspectives	117
	Conclusion et Perspectives	117
	Annexe	119
A	Unités	119
A.1	CGS-E, CGS-M, GAUSS (Heaviside-Lorentz) et MKSA	119
A.2	Unité Atomique et Naturelle	121
B	Moments Cinétiques	122
B.1	Opérateurs Moments Cinétiques	122

B.2	Coefficients de Clebsch-Gordan et Symboles $3j$	123
B.3	Harmoniques Sphériques	124
B.4	Opérateurs Tensoriels	125
B.5	Harmoniques Sphériques Vectorielles	126
Bibliographie		129

TABLE DES FIGURES

1.1	Exemple d'un diagramme de Feynman.	23
1.2	Notations dans les diagrammes de Feynman.	23
1.3	Développement d'un état lié en ordre d'interaction avec le champ. . .	24
1.4	Matrice S de l'interaction électron-électron développée en diagrammes de Feynman.	30
1.5	Diagrammes de Feynman représentant les trois termes de l'interaction électron-électron.	32
1.6	Diagramme de Feynman pour la self-énergie et polarisation du vide. .	33
1.7	Développement d'une boucle de polarisation du vide en puissance de $(Z\alpha)$	35
1.8	Diagrammes des corrections radiatives d'ordre α et α^2	36
2.1	Spectres des niveaux d'énergie d'un électron dans le champ d'un atome : classique et relativiste.	38
2.2	Effet de Brown et Ravenhall.	40
2.3	Diagrammes calculés lorsque le potentiel d'Uëhling est inclu dans le processus self-consistant	47
3.1	Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{165}\text{Ho}^{66+}$	54
3.2	Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{207}\text{Pb}^{81+}$	57
3.3	Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{185}\text{Re}^{74+}$ et $^{187}\text{Re}^{74+}$	57

3.4	Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{209}\text{Re}^{82+}$	58
3.5	Diagrammes de Feynman pour l'approximation en échelle de la partie Coulomb de l'interaction électron-électron.	64
3.6	Pourcentage de la part des corrélations coulombiennes dans la transition hyperfine totale en fonction de $1/Z$	65
3.7	Part relative en % de la contribution de la configuration (1s 2s 3s) par rapport aux corrélations coulombiennes totales	66
3.8	Diagrammes de Feynman pour Gaunt self-consistant	67
3.9	Diagrammes avec contribution du continuum négatif	67
3.10	Comparaisons des effets des corrélations magnétiques, du continuum négatif et de la part non additive.	68
3.11	Corrections radiatives à la structure hyperfine.	68
3.12	Correction à tous les ordres de la polarisation du vide.	69
3.13	Ajustement de la self-énergie pour la structure hyperfine.	71
3.14	Ensemble des corrections exprimées en pourcentage de la valeur totale de la transition hyperfine.	72
3.15	Total des corrections par rapport à l'énergie de la transition hyperfine.	73
3.16	Valeurs des transitions hyperfines du niveau fondamental des ions hydrogénoïdes et lithiuoïdes exprimées en μm en fonction du nombre atomique Z	74
3.17	Rapport entre l'énergie de transition hyperfine des ions hydrogénoïdes et lithiuoïdes.	74
4.1	Les trois types de recouvrement en fonction de R_1 , R_2 et d	99
4.2	Paramètres et coordonnées utilisés dans le cas d'un recouvrement total ou nul de la particule et du noyau.	100
4.3	Paramètres et coordonnées utilisés dans le cas d'un recouvrement partiel de la particule et du noyau.	101
4.4	Niveaux d'énergie de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$	105

5.1	Variation de l'énergie de transition 5g-4f du $\pi^{14}\text{N}$ en fonction de la masse du pion.	114
5.2	Comparaison des différentes mesures de la masse du pion.	115

LISTE DES TABLEAUX

1.1	Labels et nombres quantiques.	29
3.1	Comparaison entre les différents calculs théoriques et les mesures expérimentales dans les hydrogéoïdes.	55
3.1	(Suite)	56
3.2	Transition hyperfine du niveau fondamental des hydrogéoïdes	59
3.2	(Suite)	60
3.3	Calcul complet $^{209}\text{Bi}^{80+}$	62
3.4	Liste des configurations incluses dans le calcul de l'énergie de corrélation en couplage LS.	62
3.5	Décomposition de la Polarisation du vide self-consistante (VP SC) pour le $^{209}\text{Bi}^{80+}$	69
3.6	Transition hyperfine du niveau fondamental des lithiuoïdes	75
3.6	(Suite)	76
4.1	Décalage et élargissement hadroniques mesurés du niveau 1s du pro- tonium.	78
4.2	Décalage et élargissement hadronique théoriques du niveau 1s du pro- tonium.	78
4.3	Énergies de calibration anti-protoniques.	104
4.4	Énergies des niveaux hyperfins avec et sans correction du g-2 pour $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$	107
4.5	Décalage et élargissement hadroniques du niveau 2p du protonium. .	108

- 5.1 Transition 4f-3d dans $\pi^{24}\text{Mg}$ 112
- 5.2 Raie de calibration pour la mesure de la masse du pion. 112
- 5.3 Masses du pion déjà mesurées et énergies correspondantes pour la transition 5g-4f du $\pi^{14}\text{N}$ 113

INTRODUCTION

La notion d'un élément insécable constitutif de toute matière surgit dès l'Antiquité avec le terme *atome* de $\alpha\tau\omicron\mu\omicron\varsigma$: α négation et $\tau\omicron\mu\eta$ action de couper. Admise par Leucippe, Démocrite et surtout Epicure dans sa théorie des *atomes crochus*, cette conception de la matière qui porte en germe notre vision moderne ne peut être observée et n'apparaît alors que comme un concept philosophique.

Il faut attendre le XIX^e siècle, soit 25 siècles après les philosophes grecs, pour voir réapparaître la notion d'atome. En 1789, Lavoisier propose l'idée d'éléments ne pouvant être simplifiés chimiquement. On constate alors qu'un corps quelconque se décompose en plusieurs de ces éléments suivant des proportions bien définies. Réciproquement les corps simples peuvent se combiner suivant des rapports de nombres entiers pour former différents composés. Afin d'expliquer ces lois empiriques, Dalton suppose en 1808 que les corps simples sont constitués de particules élémentaires identiques : les atomes.

Rapidement, l'atome moderne s'avère être un objet plus riche que ne le laisse supposer son sens étymologique. Crookes en 1889 effectuant des expériences sur les rayons cathodiques montre la nature corpusculaire de ces rayons chargés négativement et Thomson confirme l'existence des électrons en 1897. Peu après, Perrin observe que les atomes peuvent émettre des électrons. Or puisqu'ils sont électriquement neutres, les atomes doivent aussi contenir une charge positive. Ainsi l'atome n'est pas insécable mais composite. L'expérience de Rutherford en 1910 détermine la structure de la répartition des charges : l'essentiel de la masse atomique est concentrée dans un noyau chargé positivement autour duquel gravite des électrons liés par interaction électrostatique. Enfin pour expliquer la régularité des spectres de l'hydrogène constatée par Balmer dès 1885, Bohr s'appuyant sur la théorie des quanta formulée par Planck (1900) propose en 1913 son modèle planétaire de l'atome. L'étude scientifique de l'atome, de ces constituants, de ces spectres c'est à dire la Physique Atomique était, cette fois-ci, belle et bien née!

Dès son origine, la Physique Atomique a occupé une place particulière. Non seulement l'examen des spectres atomiques renseignait sur la nature des constituants de la matière, mais encore il orientait la physique vers une nouvelle approche plus à même de décrire et de comprendre les phénomènes observés : la Mécanique Quantique. Parallèlement une autre révolution s'opérait avec le principe de relativité énoncé par Einstein en 1905. Munis de ces deux théories, la Physique Atomique

allait alors livrer pendant près d'un demi siècle les informations les plus diverses sur la structure de la matière.

Devant un tel passé, on pourrait croire que la Physique Atomique n'a aujourd'hui plus rien à nous apprendre et d'aucuns ont d'ailleurs franchi le pas indiquant que les spectres atomiques avaient révélés la totalité de leurs secrets. Il n'en est rien. Depuis une vingtaine d'années, l'apparition de nouvelles sources d'ions permet d'obtenir des mesures précises d'énergies ou de probabilités de transitions dans des ions lourds à un, deux ou trois électrons. Il devient alors possible de tester les calculs théoriques de la Mécanique Quantique Relativiste et de l'Electrodynamique Quantique (QED).

Dans ce cadre, nous nous sommes intéressés à l'étude de la structure hyperfine des ions lithiumoïdes. La structure hyperfine est la séparation des niveaux d'énergie atomique en plusieurs sous niveaux du fait de l'interaction magnétique entre les électrons du cortège et le spin du noyau. Passerelles entre la physique atomique et la physique nucléaire, les transitions hyperfines vont nous renseigner sur les propriétés magnétiques du noyau. Par ailleurs, il devient possible avec les ions lithiumoïdes d'examiner les effets relativistes à plusieurs corps sans pour autant être confronté à des calculs trop compliqués du point de vue de la QED. Enfin dans les ions lourds fortement chargés, les électrons sont soumis à des champs électriques et magnétiques particulièrement intenses. Les corrections de QED sont alors de l'ordre de quelques pour-cents par rapport à l'énergie totale de la transition hyperfine. Cela permet de tester les calculs de QED avec plus de facilité. De plus dans les ions lourds $Z\alpha$ (où α est la constante de structure fine) se rapproche de 1, on accède ainsi à des corrections de QED qualitativement différentes.

Dans ce mémoire, nous présenterons le calcul de l'énergie de la transition hyperfine du niveau fondamental de l'ensemble des ions hydrogéoïdes et lithiumoïdes possédant un spin nucléaire non nul. Pour étudier les corrections de QED, nous devons les différencier des autres effets en particulier des effets nucléaires. Le plus important d'entre eux est l'effet de Bohr-Weisskopf lié à la distribution du moment magnétique dans le noyau. Utilisant un modèle de distribution très simple, les calculs dans les ions hydrogéoïdes sont essentiellement destinés à évaluer la validité de notre approche. Après quoi, nous avons calculé puis comparé les différentes contributions à l'énergie de la transition hyperfine dans les ions lithiumoïdes. Cela inclut les effets à plusieurs corps (corrélations), les corrections radiatives (polarisation du vide et self-énergie) et l'influence du continuum négatif.

Dans un autre domaine, les accélérateurs modernes fournissent des faisceaux de particules en tout genre. L'intensité de ces sources a gagnée environs trois ordres de grandeurs en l'espace de quelques années. Aujourd'hui, on est en mesure de résoudre une transition avec une précision de quelques centaines de meV, offrant ainsi de nouvelles possibilités dans l'étude des atomes exotiques. Un atome exotique est un atome dans lequel un électron du cortège est remplacé par une particule plus lourde mais de même charge comme par exemple : μ^- , π^- , K^- , Σ^- ou \bar{p} . L'existence de ces atomes a été suggérée dès 1947 par Wheeler à la suite de la découverte du meson π

(pion). Dans la mesure où ces particules possèdent une masse plus élevée que celle de l'électron, le rayon moyen des états liés est plusieurs ordres de grandeur plus petit que dans les atomes ordinaires et peut devenir comparable au rayon du noyau. Ainsi les atomes exotiques constituent un excellent outil d'étude de la structure du noyau et de l'interaction noyau-particule. La spectroscopie des atomes exotiques permet également la mesure des propriétés de la particule elle-même : masse, moment magnétique...

Nous exposerons dans ce mémoire, les calculs de haute précision de transitions dans les atomes exotiques nécessaires à l'interprétation de deux expériences : la mesure de paramètres de l'interaction forte dans l'hydrogène anti-protonique ($\bar{p}\text{H}$) et la détermination de la masse du pion par les raies-X de l'azote pionique (πN). Pour obtenir la précision souhaitée, nos calculs prennent en compte la structure hyperfine des niveaux. Nous avons également dû modifier le calcul d'une correction radiative : la polarisation du vide. Dans les atomes exotiques, la masse des particules est plus importante que dans les atomes ordinaires. En raisonnant avec le modèle planétaire de Bohr, cela implique que le rayon moyen des orbitales se trouve plus proche du noyau. Or la polarisation du vide, sensible à ce paramètre, devient beaucoup plus importante que dans les atomes électroniques ordinaires. Elle ne peut plus être traitée au premier ordre de la théorie des perturbations. Nous avons aussi ajouté des termes nouveaux : le $g - 2$ et la taille finie de la particule. La correction du $g - 2$ provient de la valeur implicite $g = 2$ du moment magnétique d'une particule dans l'équation de Dirac. Il est nécessaire pour une particule comme l'anti-proton où $g = -5.5856\dots$ de tenir compte de la correction que cela entraîne. Contrairement aux électrons, les pions et anti-protons ne sont pas des particules ponctuelles. Avec la correction de la taille finie, nous avons inclus la distribution de charge de la particule dans le calcul du potentiel électrostatique entre la particule et le noyau.

Dans le premier chapitre, nous commencerons par rappeler les bases et le formalisme des calculs de la Mécanique Quantique Relativiste. Au chapitre deux sont exposés les problèmes plus spécifiques des calculs relativistes à N-corps et les techniques de résolution utilisées. Le chapitre trois présente les calculs et les résultats de l'étude des transitions hyperfines dans les ions lithiumoïdes. Dans une quatrième partie, nous calculerons les corrections nécessaires à une évaluation correcte des transitions dans les atomes anti-protoniques. Nous donnerons également les résultats permettant d'établir le décalage et l'élargissement hadroniques du niveau $2p$ de l'hydrogène anti-protonique. Enfin nous terminerons chapitre cinq par les calculs de raies relatifs à la mesure de la masse du pion.

1. MÉCANIQUE QUANTIQUE RELATIVISTE

1.1 Introduction

Créée au début du siècle, la mécanique quantique classique par opposition à relativiste est entièrement basée sur l'équation de Schrödinger. Cette équation d'onde déduite du formalisme hamiltonien de la mécanique classique obéit aux propriétés de l'hamiltonien dont elle est issue. En particulier, l'hamiltonien classique d'une particule libre s'établit sur les exigences générales d'homogénéité et d'isotropie de l'espace, ainsi que sur le principe d'invariance par rapport aux transformations de Galilée. Les propriétés physiques prévues par la théorie de Schrödinger sont alors invariantes par translations et rotations de l'espace et dans tous les changements de repère par transformation ... de Galilée.

Or, découlant du principe de relativité énoncé par Einstein, la vitesse de propagation maximale des interactions reste la même dans tous les référentiels d'inertie. Cette constante universelle a pour valeur la vitesse de propagation de la lumière dans le vide :

$$c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}. \quad (1.1)$$

Par suite, les formules relativistes permettant de passer d'un référentiel d'inertie à un autre ne sont plus les transformations de Galilée mais de Lorentz. Par conséquent dans les phénomènes où les vitesses des particules mises en jeu ne sont pas négligeables devant la vitesse de la lumière, l'équation de Schrödinger et la mécanique quantique classique deviennent inadaptées pour décrire correctement les phénomènes physiques. Il y a donc une nécessité à construire une nouvelle équation susceptible d'être la base d'une mécanique quantique relativiste : c'est l'équation de Dirac.

On pourrait croire que le passage à une théorie relativiste peut s'effectuer par une généralisation plus ou moins aisée des outils de la mécanique quantique classique. Au contraire, il est nécessaire pour bâtir une théorie logique et cohérente d'introduire de nouvelles notions physiques. Nous verrons en particulier qu'une des principales difficultés pour une théorie relativiste provient de la non conservation du nombre de particules.

Dans ce chapitre, nous commencerons par rappeler le formalisme des calculs relativistes. Puis nous esquisserons les règles de lecture des diagrammes de Feynman, ces derniers permettant une meilleure compréhension physique des corrections utilisées par la suite. Nous examinerons alors les problèmes relativistes à un corps en commençant par établir l'équation d'une particule de spin nul. Après avoir observé les particularités générées par une telle équation, nous examinerons l'équation de Dirac ainsi que la forme des fonctions d'onde qui lui sont associées. Puis nous donnerons l'opérateur de l'interaction électron-électron nécessaire aux calculs à N-corps du chapitre suivant. Enfin nous terminerons par les corrections radiatives que sont la self-énergie et la polarisation du vide.

1.2 Notations

Unités

Nous utiliserons comme système d'unités le MKSA. Cependant pour alléger l'écriture, la plupart des expressions seront exprimées en unité atomique où

$$\hbar = m_e = e = 1. \quad (1.2)$$

Afin de faciliter toute comparaison avec la littérature, l'annexe A regroupe les systèmes d'unité les plus fréquemment utilisés.

Quadrivecteur Position

On définit le quadrivecteur position d'un point de l'espace-temps par la donnée de trois coordonnées spatiales de l'espace ordinaire (x, y, z) et d'un instant t . Les composantes du quadrivecteur sont alors respectivement

$$x^0 = ct, \quad x^1 = x, \quad x^2 = y, \quad x^3 = z \quad (1.3)$$

et nous utiliserons les écritures équivalentes

$$x^\mu \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (x^0, x^i) \equiv (ct, \mathbf{r}). \quad (1.4)$$

Par convention, un indice constitué par une lettre grecque prend les valeurs 0, 1, 2 ou 3 et désigne une composante quelconque du quadrivecteur tandis qu'un indice latin ne prend que les valeurs 1, 2 ou 3 et correspond aux composantes de l'espace ordinaire.

Métrie, Coordonnées Contravariantes et Covariantes

Du principe de relativité découle une invariance de la distance entre deux points de l'espace-temps par rapport à un changement de référentiel d'inertie. Par conséquent il est commode d'utiliser une géométrie dans laquelle le carré de la distance d'un point quelconque à l'origine est conservé par transformation de Lorentz. Cette géométrie quadridimensionnelle développée par H. Minkowski pour la théorie relativiste est dite pseudo-euclidienne. Cela signifie que la règle de formation de la distance dans l'espace quadridimensionnel diffère de la règle habituelle au sens où la sommation sur les carrés des coordonnées s'effectue avec des termes n'ayant pas le même signe. La métrique adoptée ici a pour signature $(+ - - -)$. Avec la convention de sommation sur les indices répétés, la norme de x^μ s'écrit alors :

$$x^\mu x_\mu = (x_0)^2 - (x_1)^2 - (x_2)^2 - (x_3)^2 = (ct)^2 - \mathbf{r}^2, \quad (1.5)$$

où nous introduisons par commodité les coordonnées contravariantes x^μ du quadri-vecteur et ses coordonnées covariantes x_μ . On a :

$$x^0 = x_0 \quad \text{et} \quad x^i = -x_i. \quad (1.6)$$

Produit Scalaire

Avec nos conventions, le produit scalaire de deux vecteurs s'obtient en contractant les composantes contravariantes de l'un avec les composantes covariantes de l'autre

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} = X^\mu Y_\mu = X_\mu Y^\mu = X^0 Y^0 - \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} = X^0 Y^0 - X^i Y^i. \quad (1.7)$$

D'une manière générale, les lettres en gras font référence au vecteur spatial composante tridimensionnelle du quadri-vecteur. Il est nécessaire d'identifier correctement vecteur classique tridimensionnel et quadri-vecteur afin de pouvoir faire la différence entre :

$$\begin{aligned} X_i &= -X^i && \text{une composante spatiale d'un quadri-vecteur } X_\mu \\ \text{et} &&& \\ X_i &= X^i && \text{une composante d'un vecteur classique } \mathbf{X}. \end{aligned}$$

Gradient et d'Alembertien

Aux dérivations partielles des coordonnées *covariantes* x_μ correspond l'opérateur gradient *contravariant* noté

$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\nabla \right) \quad (1.8)$$

qui se transforme en composantes *covariantes* suivant les mêmes règles (1.6) que les autres quadrivecteurs :

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \nabla \right). \quad (1.9)$$

Nous formons l'opérateur d'Alembertien par

$$\square \equiv \partial^\mu \partial_\mu \equiv \partial_0^2 - \nabla^2 \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta. \quad (1.10)$$

Les opérateurs nabla ∇ et Laplacien Δ conservent leur sens habituel

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{et} \quad \Delta \equiv \nabla \cdot \nabla. \quad (1.11)$$

Quadrivecteurs Impulsion et Potentiel

Les quadrivecteurs impulsion et potentiel sont définis par

$$p^\mu \equiv \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) \quad (1.12)$$

où E est l'énergie de la particule, \mathbf{p} son impulsion et

$$A^\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, \mathbf{A} \right) \quad (1.13)$$

où ϕ est le potentiel scalaire, \mathbf{A} la potentiel vecteur. Nous utiliserons également l'opérateur

$$\pi^\mu \equiv (p^\mu - qA^\mu) \quad (1.14)$$

dans lequel q est la charge *algébrique* de la particule considérée.

Quadritenseur Champ

Les composantes $X^{\mu\nu}$ d'un quadritenseur d'ordre deux sont de trois types : contravariantes $X^{\mu\nu}$, covariantes $X_{\mu\nu}$ et mixtes $X^\mu{}_\nu$ et $X_\nu{}^\mu$. Elles obéissent aux mêmes règles d'élévation et d'abaissement des indices que les composantes des quadrivecteurs

$$\begin{aligned} X_{00} &= X^{00}, & X_0^0 &= X^{00}, & \dots \\ X_{01} &= -X^{01}, & X_0^1 &= X^{01}, & X_1^0 &= -X^{10}, \dots \\ X_{11} &= X^{11}, & X_1^1 &= -X^{11}, & \dots \end{aligned}$$

Le quadritenseur (ou plus simplement tenseur) $X^{\mu\nu}$ est :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{symétrique ssi } X^{\mu\nu} = X^{\nu\mu} & \text{d'où } X^\mu{}_\nu = X_\nu{}^\mu = X_\nu^\mu \\ \text{anti-symétrique ssi } X^{\mu\nu} = -X^{\nu\mu} & \text{d'où } X^\mu{}_\mu = 0 \end{array} \right. \quad (1.15)$$

Une contraction de deux indices sur un tenseur diminue celui-ci de deux ordres. La trace du tenseur d'ordre deux $X^{\mu\nu}$ est le scalaire

$$Tr[X^{\mu\nu}] = X^\mu_\mu = X_0^0 + X_1^1 + X_2^2 + X_3^3. \quad (1.16)$$

Le produit scalaire de deux vecteurs X^μ et Y^ν est la contraction du tenseur $X^\mu Y_\nu$, soit le scalaire $X^\mu Y_\mu$ trace du tenseur $X^\mu Y^\nu$.

Le tenseur champ électromagnétique est défini par

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad (1.17)$$

c'est un tenseur antisymétrique que l'on peut exprimer à l'aide des expressions du champ électrique \mathbf{E} et du champ magnétique \mathbf{B} :

$$\begin{cases} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \\ \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \end{cases} \quad (1.18)$$

Nous avons alors

$$F^{\mu\nu} \equiv \left(-\frac{\mathbf{E}}{c}, \mathbf{B} \right) = \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

et

$$F_{\mu\nu} = \left(\frac{\mathbf{E}}{c}, \mathbf{B} \right). \quad (1.20)$$

Tenseurs Unité, Métrique et Unité Totale Antisymétrique

On appelle tenseur unité, le tenseur δ^μ_ν satisfaisant

$$\delta^\mu_\nu X^\nu = X^\mu \quad (1.21)$$

d'où

$$\delta^\mu_\nu = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu = \nu \\ 0 & \text{si } \mu \neq \nu \end{cases}. \quad (1.22)$$

En élevant ou abaissant l'un des indices de δ^μ_ν , on obtient (dépendant de la signature) le tenseur métrique :

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

On peut alors écrire les relations (1.6) de passage des coordonnées covariantes à contravariantes sous la forme

$$X^\mu = g^{\mu\nu} X_\nu, \quad X_\mu = g_{\mu\nu} X^\nu, \quad (1.24)$$

et le produit scalaire

$$X^\mu X_\mu = g_{\mu\nu} X^\mu X^\nu = g^{\mu\nu} X_\mu X_\nu. \quad (1.25)$$

Les tenseurs δ_ν^μ et $g^{\mu\nu}$ ont la propriété d'avoir les mêmes composantes dans tous les systèmes de coordonnées. Le tenseur unité complètement antisymétrique $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$ bénéficie de cette même propriété, il est défini par

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = \begin{cases} +1 & \text{pour une permutation paire de } \{\alpha\beta\gamma\delta\} \\ -1 & \text{pour une permutation impaire} \\ 0 & \text{dans les autres cas (i.e. pour deux indices identiques)} \end{cases} \quad (1.26)$$

avec

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (1.27)$$

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} = -4! . \quad (1.28)$$

De même nous avons le tenseur antisymétrique spatial :

$$\varepsilon^{ijk} = \varepsilon_{ijk} = 1. \quad (1.29)$$

Par exemple, on peut exprimer les composantes des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} à l'aide des tenseurs champs $F^{\mu\nu}$ et antisymétrique ε^{ijk} par

$$\begin{cases} E_i = cF^{i0} & \text{soit } F^{0i} = F_{i0} = -\frac{E_i}{c} \\ B_i = -\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}F_{jk} & \text{soit } F^{ij} = F_{ij} = -\varepsilon_{ijk}B_k \end{cases} . \quad (1.30)$$

1.3 Diagrammes de Feynman

Historiquement, les calculs de QED se sont développés de manière totalement indépendante suivant deux formulations apparemment différentes. La première due à Schwinger [1, 2, 3] était basée sur une généralisation covariante des opérateurs Lagrangiens utilisés en mécanique quantique. La seconde développée par Feynman [4, 5, 6] repose sur la notion de propagateur. Feynman énonce alors un système de règles simples permettant de calculer des corrections à partir de représentations sous forme de diagrammes. Plus tard, Dyson [7] établira l'équivalence exacte entre l'approche de Schwinger et celle de Feynman.

Un diagramme donné correspond à une équation donnée et réciproquement. Facile d'utilisation, ils permettent de matérialiser la correction étudiée. Par exemple,

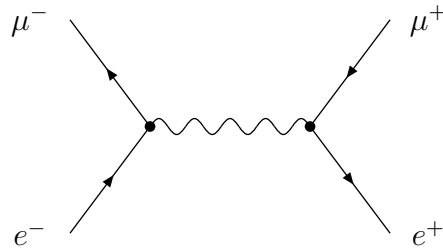


Fig. 1.1: Exemple d'un diagramme de Feynman.

le diagramme de la Figure 1.1 représente la désintégration d'un électron et de son anti-particule en paire muon positif, muon négatif : $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$.

S'il n'est pas question ici d'introduire le calcul d'une correction à partir d'un diagramme particulier, il est en revanche utile de rappeler les règles de lecture des diagrammes car ils facilitent la compréhension physique des corrections traitées par la suite.

Bien que de nombreux auteurs définissent régulièrement leur propre notation, on peut distinguer deux types différents de diagrammes de Feynman. Les diagrammes temporels décrivant l'évolution d'une particule libre au cours du temps et les diagrammes des états liés.

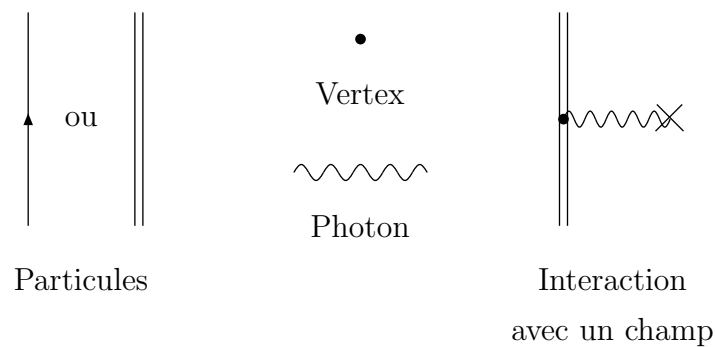


Fig. 1.2: Notations dans les diagrammes de Feynman.

Diagrammes Temporels

Le principe général de ces diagrammes de Feynman est de représenter la trajectoire des particules par leurs lignes d'espace-temps à deux dimensions ; l'une des dimensions étant spatiale, l'autre temporelle. Ainsi une particule libre immobile sera

représentée par une ligne droite verticale ou horizontale suivant l'axe choisi pour axe temporel.

Un photon est représenté par une ligne en forme d'onde comme une vaguelette. Les points noirs aux intersections sont les vertex. Les lignes intérieures (entre deux vertex) représentent des particules virtuelles. Lorsqu'une ligne est à "rebrousse" temps, elle indique une anti-particule. On peut retrouver ces notations sur la Figure 1.2.

Diagrammes d'États Liés

Ces diagrammes représentent les particules mais sans notion de temps ; les intégrales qu'ils décrivent sont déjà intégrées en temps. Les particules libres sont représentées par une ligne pleine et les états liés par un double trait. Les photons sont encore matérialisés par une vaguelette et les vertex par un point. L'interaction avec un champ est une croix (le champ) reliée à la particule par un vaguelette interne (un photon virtuel transmetteur de l'interaction). Un état lié est en fait un développement infini d'interaction avec le champ (Fig. 1.3). D'une manière générale, les diagrammes des états liés représentent des corrections que l'on peut développer en α la constante de structure fine. Ajouter une ligne photonique (vaguelette) supplémentaire sur un diagramme l'augmente d'un ordre en α . La correction qui lui est attachée est donc à peu près d'un ordre α inférieur à la précédente.

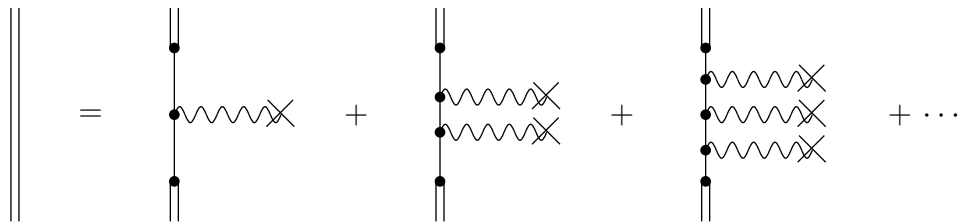


Fig. 1.3: Développement d'un état lié en ordre d'interaction avec le champ.

1.4 Problèmes Relativistes à Un Corps

La théorie relativiste de calcul des niveaux d'énergie d'un atome est basée sur l'équation de Dirac d'un électron dans le champ Coulombien du noyau. En particulier, les fonctions d'onde relativistes d'un atome à N-particules sont construites à partir des orbitales décrivant un électron dans un potentiel central. Il est donc

nécessaire d'examiner le problème des calculs relativistes à un électron. Pour simplifier, nous commencerons par établir l'équivalent relativiste de l'équation de Schrödinger pour une particule sans spin. Puis nous passerons aux particules de spin 1/2 avec l'équation de Dirac et la structure des fonctions d'onde relativistes de l'électron.

1.4.1 Équation de Klein-Gordon

Rappelons que l'équation de Schrödinger d'une particule libre s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi \quad (1.31)$$

et provient de la relation classique entre l'énergie E et l'impulsion \mathbf{p}

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (1.32)$$

à laquelle on applique le principe de correspondance de la mécanique quantique ¹

$$p^\mu \rightarrow i\hbar \partial^\mu. \quad (1.34)$$

Afin d'établir empiriquement l'équation relativiste recherchée, il est alors naturel de prendre pour point de départ

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (1.35)$$

équivalent relativiste de la relation (1.32). Malheureusement, effectuer directement la substitution (1.34) dans cette relation conduit à une équation inadaptée

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = c \sqrt{-\hbar^2 \Delta + m^2 c^2} \psi \quad (1.36)$$

où manipuler la racine carré du second membre est source de problèmes. De plus, du fait de la dissymétrie de traitement entre les coordonnées spatiales et temporelle, l'invariance relativiste d'une telle équation n'apparaît pas clairement. La meilleure solution pour contourner ces deux difficultés consiste à élever au carré chaque membre de l'équation (1.35) avant d'appliquer la règle de correspondance. On obtient ainsi l'équation dite de *Klein-Gordon* [] pour les particules libres :

$$(\hbar^2 \square + m^2 c^2) \psi = 0. \quad (1.37)$$

Elle est invariante relativiste et ne concerne que les particules de spin nul.

L'interprétation de l'équation de Klein-Gordon laisse apparaître quelques propriétés tout à fait inhabituelles :

¹ Pour le cas d'une particule liée, il suffit d'ajouter un champ électro-magnétique décrit par son quadripotential A^μ en remplaçant p^μ par $\pi^\mu = p^\mu - qA^\mu$, soit alors la substitution

$$p^\mu \rightarrow i\hbar \partial^\mu - qA^\mu \quad (1.33)$$

1. Contrairement à l'équation de Schrödinger, elle est du second ordre par rapport au temps. Ceci implique que pour suivre l'évolution de la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ à chaque instant t , il faut connaître à un instant initial t_0 non seulement la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ mais aussi la dérivée $\partial\psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$. L'état du système n'est alors plus représenté par la seule fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ mais par une fonction d'onde à deux composantes combinaisons linéaires de $\psi(\mathbf{r}, t)$ et $\partial\psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$.
2. L'équation de Klein-Gordon autorise, des solutions d'énergies négatives. Par exemple, une solution du type onde plane

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (1.38)$$

est solution de l'équation (1.37) quel que soit le signe de E . En effet, par construction de l'équation de Klein-Gordon, une solution $\psi(\mathbf{r}, t)$ doit satisfaire la condition

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.39)$$

qui est plus générale que la relation (1.35). Les énergies négatives

$$E = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (1.40)$$

sont donc traitées de manière équivalente aux énergies positives de la physique habituelle.

3. Une troisième particularité de l'équation de Klein-Gordon surgit lorsque l'on souhaite interpréter la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$. Pour cela, comme en physique non relativiste, écrivons l'équation de continuité

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (1.41)$$

où le quadrivecteur j^μ est ici défini par

$$j^\mu \equiv (c\rho, \mathbf{j}) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\partial^\mu \psi) - (\partial^\mu \psi^*) \psi]. \quad (1.42)$$

Classiquement, ρ est interprétée comme la densité de probabilité de présence de la particule et \mathbf{j} comme le courant de probabilité de présence. Or suite aux possibilités d'énergies négatives énoncées précédemment, ces quantités ne sont plus définies positives. Il faut alors les réinterpréter de la manière suivante : $q\rho$ est la densité de charge électrique et $q\mathbf{j}$ le courant électrique. Dans ce cadre $e\psi^*\psi$ devient la densité de charge et

$$Q = e \int \psi^* \psi d\mathbf{r}, \quad (1.43)$$

la charge totale invariante du système. Autrement dit, ce ne sont plus les particules mais les charges qui se conservent. Les particules, elles, peuvent se créer et s'annihiler.

L'existence des solutions d'énergies négatives liées à la construction d'une équation relativiste modifie profondément la structure de la théorie. C'est une nouvelle physique qui apparaît avec la théorie relativiste.

1.4.2 Équation de Dirac

En tenant compte des contraintes précédentes, Dirac cherche une équation du premier ordre en temps . Pour cela, il souhaite éviter l'apparition de la racine carré de l'équation (1.35) en écrivant

$$E = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 \quad (1.44)$$

où $\boldsymbol{\alpha}$ et β sont des opérateurs à déterminer n'agissant que sur les variables de spin. Avec le principe de substitution, les fonctions d'onde solutions vérifient l'équation

$$[p_0 - \alpha^i p_i - \beta mc] \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.45)$$

et à cause du principe de correspondance, Dirac exige qu'elles vérifient également l'équation de Klein-Gordon. Multipliant à gauche par l'opérateur $[p_\mu + mc]$, un calcul simple donne les conditions que doivent remplir $\boldsymbol{\alpha}$ et β afin que l'équation du second ordre s'identifie à l'équation de Klein-Gordon :

$$\begin{cases} \{\alpha^\mu, \alpha^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu} \\ \{\alpha^\mu, \beta\} = 0 \\ \beta^2 = 1. \end{cases} \quad (1.46)$$

En introduisant l'opérateur

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}) \quad (1.47)$$

tel que

$$\gamma^0 \equiv \beta \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\gamma} \equiv \beta\boldsymbol{\alpha}, \quad (1.48)$$

les conditions (1.46) deviennent

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}. \quad (1.49)$$

Il apparaît alors que les composantes de γ^μ sont des matrices 4×4 . La représentation traditionnellement utilisée en physique atomique est celle de Dirac

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

dans laquelle I est la matrice unité 2×2 et où les composantes de $\boldsymbol{\sigma}$ sont les matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

Et l'équation de Dirac s'écrit simplement

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.52)$$

1.4.3 Fonctions d'onde

Suite aux propriétés de l'équation de Klein-Gordon, la fonction d'onde d'une particule libre de spin nul passe d'une seule composante dans le cas classique, à deux composantes dans le cas relativiste. Bien que n'étant plus du second ordre en temps, l'équation de Dirac n'en possède pas moins une structure particulière qui va également induire des modifications entre la fonction d'onde classique et relativiste. Pour une particule de spin 1/2, les fonctions d'ondes classique est le spineur

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\mathbf{r}) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.53)$$

où chaque composante correspond à une valeur propre du spin de l'électron. Pour un état caractérisé par les valeurs l pour le moment orbital \mathbf{l} , m pour sa projection l_z et j pour le moment cinétique total \mathbf{j} , ce spineur peut s'écrire sous la forme

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\chi_{jlm}(\theta, \varphi), \quad (1.54)$$

avec $R_{nl}(r)$ une partie radiale à déterminer et $\chi_{jlm}(\theta, \varphi)$ les spineurs sphériques à deux composantes de Pauli. Ces derniers sont parfaitement déterminés par la donnée de j, l, m et valent [8]

$$\chi_{jlm}(\theta, \varphi) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \langle l, m - \sigma, 1/2, \sigma | l, 1/2, j, m \rangle Y_l^{m-\sigma}(\theta, \varphi) \phi^\sigma \quad (1.55)$$

où nous trouvons respectivement un coefficient de Clebsch-Gordan, une harmonique sphérique et l'un des deux spineurs de Pauli suivant

$$\phi^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \phi^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.56)$$

En exprimant les différents coefficients, on peut encore écrire

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \chi_{jlm} = \begin{bmatrix} \left[\frac{j+m}{2j} \right]^{1/2} Y_{j-1/2}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \left[\frac{j-m}{2j} \right]^{1/2} Y_{j-1/2}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} \quad (1.57)$$

$$j = l - \frac{1}{2} \quad \chi_{jlm} = \begin{bmatrix} - \left[\frac{j+1-m}{2j+2} \right]^{1/2} Y_{j+1/2}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \left[\frac{j+1+m}{2j+2} \right]^{1/2} Y_{j+1/2}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}.$$

Dans le cas relativiste, l'hamiltonien général d'un électron se déplaçant dans un champ central $V(r)$

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(r), \quad (1.58)$$

Labels	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	$f_{5/2}$
κ	-1	1	-2	2	-3	3
j	1/2	1/2	3/2	3/2	5/2	5/2
l	0	1	1	2	2	3

Tab. 1.1: Labels et nombres quantiques.

est invariant par rotation et par parité

$$[H_D, \mathbf{j}] = 0, \quad [H_D, \mathbf{\Pi}] = 0, \quad (1.59)$$

avec \mathbf{j} le moment angulaire total et $\mathbf{\Pi} \equiv \beta\pi$ l'équivalent de Dirac de l'opérateur parité π . Nous devons donc construire une fonction propre simultanée de H_D , j^2 , j_z et de Π . Or $\chi_{jlm}(\theta, \phi)$ satisfait

$$\mathbf{j}^2 \chi_{jlm} = j(j+1)\hbar^2 \chi_{jlm} \quad (1.60)$$

$$\mathbf{l}^2 \chi_{jlm} = l(l+1)\hbar^2 \chi_{jlm} \quad (1.61)$$

$$\mathbf{s}^2 \chi_{jlm} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{jlm} \quad (1.62)$$

$$j_z \chi_{jlm} = m\hbar \chi_{jlm} \quad (1.63)$$

et est de parité $(-1)^l$. En introduisant l'opérateur $K = \beta(I + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l})$ défini par

$$(I + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l})\chi_{jlm} = \kappa \chi_{jlm}, \quad (1.64)$$

où

$$\begin{cases} \kappa = +\left(j + \frac{1}{2}\right) & \text{pour } l = j + \frac{1}{2} \\ \kappa = -\left(j + \frac{1}{2}\right) & \text{pour } l = j - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (1.65)$$

on peut mettre la fonction d'onde sous la forme

$$\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r)\chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

et

$$K\psi_{n\kappa m} = \kappa\psi_{n\kappa m}. \quad (1.67)$$

Les nombres quantiques n , κ , m sont respectivement le nombre quantique principal, le nombre κ incluant à la fois la parité π et le moment angulaire total j , et la valeur propre de j_z . Les états propres de H_D sont alors classés comme indiqué dans le tableau (1.1).

1.5 Interaction Électron-électron

Jusqu'à présent, nous n'avons discuté que d'hamiltonien relativiste à une seule particule. Pour effectuer des calculs dans des systèmes atomiques à N-corps, il nous

faut maintenant un opérateur décrivant l'interaction électron-électron. Celui-ci peut être déduit de l'électrodynamique quantique (QED) à partir du formalisme de la matrice S en représentation d'états liés.

La matrice S décrit l'interaction entre deux électrons en termes de photons émis par le premier électron et absorbés par le second. Ainsi, on peut représenter l'élément de matrice S entre deux états $|AB\rangle$ et $|CD\rangle$ par une somme infinie de diagrammes de Feynman (Fig. 1.4).

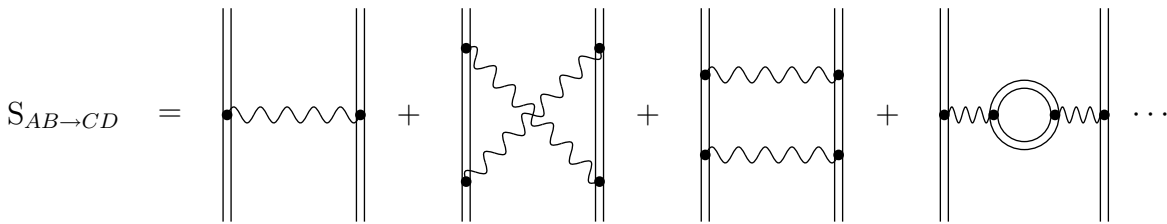


Fig. 1.4: Matrice S de l'interaction électron-électron développée en diagrammes de Feynman.

Chaque diagramme étant d'ordre α^n , où n correspond au nombre de photons échangés, cela équivaut à un développement en α de $S_{AB \to CD}$. L'opérateur d'interaction électron-électron est calculé dans l'approximation où un seul photon est échangé [9]. Quand on se limite au premier ordre du développement en α seul le premier diagramme de la Figure 1.4 contribue. A partir des règles de Feynman appliquées sur ce diagramme on exprime l'élément de matrice $S_{AB \to CD}$ par

$$S_{AB \to CD} = \alpha \int \int \bar{\psi}_C(x_1) \bar{\psi}_D(x_2) \gamma_1^\mu D_{\mu\nu}(x_1 - x_2) \gamma_2^\nu \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) d^4x_1 d^4x_2 \quad (1.68)$$

où ψ sont les fonctions d'onde à un électron (1.66), γ^μ les matrices de Dirac (1.50) et $D_{\mu\nu}$ le propagateur photonique.

Pour obtenir l'opérateur recherché, il suffit d'effectuer l'intégration en temps de l'expression précédente. Cette opération soulève cependant deux difficultés. En premier lieu, il faut connaître la dépendance temporelle des fonctions d'onde ψ pour chaque électron. Or, en relativité chaque particule possède son temps propre. Nous devons donc passer d'un formalisme multi-temps à une forme Hamiltonienne qui par structure est mono-temps. La seconde difficulté provient des diverses jauges dans lesquelles il est possible d'expliciter $D_{\mu\nu}$. Examinons ces deux problèmes à partir des résultats.

En jauge de Lorentz l'opérateur est donné par

$$g_L(1, 2) = \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} \cos(\omega_{12} r_{12}) \quad (1.69)$$

et en jauge de Coulomb par

$$g_C(1, 2) = \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} \cos(\omega_{12} r_{12}) + (\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \nabla_1)(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \nabla_2) \frac{\cos(\omega_{12} r_{12}) - 1}{\omega_{12}^2 r_{12}} \quad (1.70)$$

avec $\boldsymbol{\alpha}_i$ les matrices de Dirac,

$$r_{12} = | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 | \quad (1.71)$$

la distance interélectronique,

$$\omega_{12} = \omega_{AC} = \alpha | \epsilon_A - \epsilon_C | = \omega_{BD} = \alpha | \epsilon_B - \epsilon_D | \quad (1.72)$$

la fréquence du photon virtuel échangé et ϵ_i les énergies de liaison des électrons. Dans les deux expressions, on reconnaît le terme de Coulomb classique en $1/r_{12}$ de l'interaction électron-électron.

Le problème du multi-temps apparaît explicitement à travers la présence de la fréquence ω_{12} . C'est un terme relativiste qui disparaît à la limite classique lorsque l'on fait tendre la vitesse de la lumière vers l'infini. Il est calculé à partir de l'énergie monoélectronique des électrons. Par suite, les équations (1.69) et (1.70) ne définissent pas des opérateurs au sens usuel dans la mesure où elles dépendent des fonctions d'onde monoélectroniques par l'intermédiaire de ω_{12} .

A priori, la QED ne dépend pas de la jauge choisie. Malheureusement ceci n'est vrai que pour le résultat complet prenant en compte l'ensemble des termes. En revanche, la dépendance de jauge des opérateurs est un problème important dans le cas de solutions approchées. L'indépendance de jauge de l'opérateur décrivant l'interaction entre électron est conservée tant que les fonctions d'onde électroniques restent solutions d'équations différentielles locales. Par contre dès que les potentiels utilisés ne sont plus locaux, comme dans les calculs Multi-Configurationnels, la dépendance de jauge est forte [10]. Concernant l'interaction entre électrons, il a été démontré [11, 12, 13] que la meilleure jauge est celle de Coulomb. En effet, la jauge de Lorentz introduit des termes supplémentaires de valeur importante qui ne s'annulent que si l'on inclut dans le calcul des diagrammes à photons croisés. Les équations (1.69) et (1.70) ne sont équivalentes qu'à la limite $\omega_{12} = 0$. Nous avons alors

$$g_L(1, 2) = g_C(1, 2) = \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} \quad (1.73)$$

dite interaction de Gaunt ou interaction magnétique.

Nous utiliserons l'opérateur en jauge de Coulomb écrit sous la forme de trois parties bien distinctes [14, 15]

$$g_{12} = g_{12}^{Coul} + g_{12}^{Mag} + g_{12}^{Ret} \quad (1.74)$$

avec

$$g_{12}^{Coul} = \frac{1}{r_{12}} \quad (1.75)$$

$$g_{12}^{Mag} = -\frac{\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} \quad (1.76)$$

$$g_{12}^{Ret} = \left[-\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 \frac{\cos(\omega_{12}r_{12}) - 1}{r_{12}} + (\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \nabla_1)(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \nabla_2) \frac{\cos(\omega_{12}r_{12}) - 1}{\omega_{12}^2 r_{12}} \right]. \quad (1.77)$$

g_{12}^{Coul} correspond à l'interaction de Coulomb classique. g_{12}^{Mag} est l'interaction magnétique, elle correspond aux interactions spin-spin, spin-autre orbite et orbite-orbite de l'approximation de Pauli. Enfin g_{12}^{Ret} est appelé terme de retard car contenant ω_{12} , il provient de ce que la vitesse de la lumière est finie. Ces trois termes distincts sont respectivement représentés par les diagrammes de la Figure 1.5.

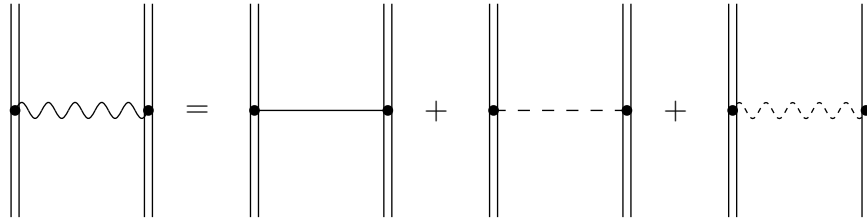


Fig. 1.5: Diagrammes de Feynman représentant les trois termes de l'interaction électron-électron.

1.6 Corrections Radiatives

D'après la théorie élaborée par Dirac, les niveaux d'énergies $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l'atome d'Hydrogène sont dégénérés. Or en 1947, Lamb et Retherford [16] mesurent avec précision un déplacement entre les deux niveaux de 1057 MHz. Connue sous le nom de déplacement de Lamb (Lamb shift), cet effet s'explique par les *corrections radiatives*.

Il existe deux contributions élémentaires de nature complètement différente constituant les corrections radiatives : la self-énergie et la polarisation du vide. À l'ordre le plus bas en α , elles sont respectivement représentées par les diagrammes de Feynman de la Figure 1.6. Ces deux contributions complètent le diagramme de l'interaction électron-électron (Fig. 1.5) et achèvent ainsi la palette des briques élémentaires à une ligne photonique utilisées pour bâtir l'ensemble des corrections de QED.

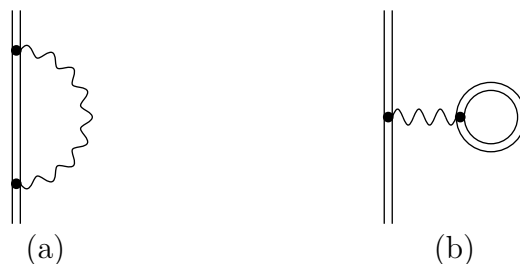


Fig. 1.6: Diagrammes de Feynman pour la self-énergie (a) et la polarisation du vide (b).

1.6.1 La Self-énergie

Comme le montre le diagramme (a) de la Figure 1.6, la self-énergie (SE) correspond physiquement à l'émission puis la réabsorption d'un photon virtuel par une particule liée. C'est de loin la correction radiative la plus importante dans les atomes usuels. C'est aussi la plus difficile à calculer. En effet, cette correction est divergente et doit donc être renormalisée.

C'est l'utilisation de la masse observée de l'électron (mesurée expérimentalement) à la place de la masse nue (celle d'un électron libre) dans le calcul de la self-énergie qui est la cause des divergences. On renormalise alors avec l'idée suivante : la self-énergie d'un électron libre est l'émission puis la réabsorption du même photon virtuel que pour l'électron lié. Cette interaction que nous désignerons par δm est déjà contenue dans la masse observable de l'électron lié. Cette dernière peut donc s'écrire $m_{obs} = m_{nu} + \delta m$. La self-énergie d'un électron libre est alors interprétée comme la différence de masse entre un électron lié à un champ électromagnétique et un électron libre. En conservant dans les équations la masse observée m_{obs} mais corrigée par la soustraction d'un terme supplémentaire lié à δm , on obtient le calcul non-divergent qui s'effectuerait avec m_{nu} . En fait, comme en physique on ne mesure que des différences d'énergie, cela revient à considérer que la self-énergie d'un électron libre est le zéro d'énergie de la self-énergie d'un électron lié.

Pour rendre compte du déplacement de Lamb, Bethe [17] utilise l'idée précédente pour proposer un premier calcul non-relativiste dès 1947. En développant le champ en puissance de $Z\alpha$, Kroll et Lamb [18] effectue le premier traitement relativiste à peine deux ans plus tard. Il converge lentement et donne de mauvais résultats aux Z élevés (au dessus de l'Argon). Appliquant une méthode proposée par Brown, Langer et Schaeffer [19, 20], Desiderio et Johnson [21] calculent la self-énergie des états dans un potentiel central mais la résolution numérique proposée n'est utilisable en pratique que pour les $Z > 70$.

Un calcul exact de la self-énergie a été effectué par Mohr [22, 23, 24] et concerne

les systèmes à un électron :

$$\Delta E^{SE} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} F(Z\alpha) mc^2 \quad (1.78)$$

où

$$\begin{aligned} F(Z\alpha) = & A_{40} + A_{41} \ln(Z\alpha)^{-2} + A_{50}(Z\alpha) + A_{60}(Z\alpha)^2 + \\ & A_{61}(Z\alpha)^2 \ln(Z\alpha)^{-2} + A_{62}(Z\alpha)^2 \ln^2(Z\alpha)^{-2} + A_{70}(Z\alpha)^3 + \dots \end{aligned} \quad (1.79)$$

est une fonction variant lentement en $Z\alpha$.

1.6.2 La Polarisation du Vide

La polarisation du vide (vacuum polarization : VP) est liée à la possibilité de création et d'annihilation d'une paire virtuelle électron-positron dans le vide. D'où le diagramme de Feynman en forme de boucle qui représente cette correction (Fig. 1.6). Dans le cas d'une particule libre cet effet n'est pas observable. En revanche, pour une particule liée, la paire virtuelle est créée en présence d'un champ Coulombien : l'électron a alors tendance à être attiré par le noyau et le positron à s'en éloigner. Cette *polarisation* du vide entre la particule liée et le noyau écrante partiellement la charge du noyau perçue par la particule. Sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde de Compton de l'électron (voir Eq. 1.81 ci dessous), la particule liée perçoit la paire virtuelle électron-positron et le noyau apparaît avec une charge effective inférieure à sa charge nue. A grande distance, la paire n'est pas perçue et la charge du noyau reste celle du noyau nu. Cette correction est donc d'autant plus importante que la fonction d'onde de la particule liée est proche du noyau. Par exemple, les effets de la polarisation du vide sont plus grands lorsqu'à particules identiques on considère les orbitales 1s ou 2s plutôt que des orbitales plus éloignées du noyau ; ou encore, lorsqu'à orbitales identiques on considère une particule liée de même charge que l'électron mais de masse plus élevée (anti-proton, muon, ...).

Contrairement à la self-énergie, Wichmann et Kroll [25] ont montré que la polarisation du vide peut s'écrire sous la forme d'un potentiel effectif

$$V^{VP} = \sum_{i=1, j=0}^{\infty} V_{i, 2j+1} \quad (1.80)$$

où $V_{i, 2j+1}$ est le potentiel d'ordre $\alpha^i (Z\alpha)^j$. L'ordre en α^i correspond au nombre de boucles qui écrantent le noyau vis à vis de la particule liée alors que l'ordre en $(Z\alpha)^j$ est un développement du nombre d'interactions avec le champ. Ainsi, le diagramme à boucle en double trait de la Figure 1.6 représente la somme sur j des potentiels d'ordre 1 en α (Figure 1.7).

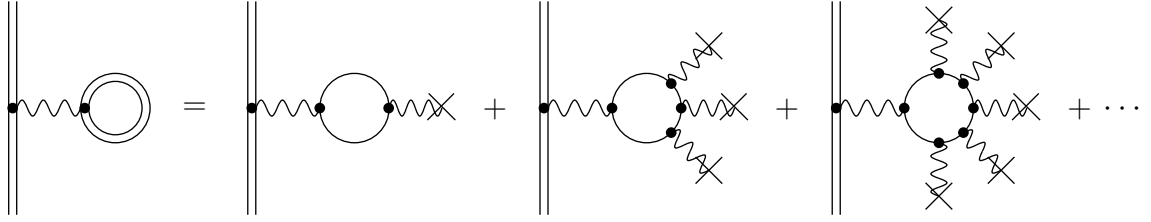


Fig. 1.7: Développement d'une boucle de polarisation du vide en puissance de $(Z\alpha)$.

Le premier terme V_{11} s'appelle le potentiel d'Uëhling [26]. Pour une distribution de charge nucléaire $\rho(\mathbf{r})$, ce potentiel s'écrit en MKSA [27]

$$V_{11}(\mathbf{r}) = -\frac{2}{3} \frac{\alpha e^2}{\pi} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \chi_1\left(\frac{2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{\lambda_e}\right) d^3r' \quad (1.81)$$

avec $\int \rho(\mathbf{r}') d^3r' = Z$, e la charge élémentaire et χ_1 donné par

$$\chi_n(x) = \int_1^\infty e^{-xt} t^{-n} \left(\frac{1}{t} + \frac{1}{2t^3} \right) \sqrt{t^2 - 1} dt. \quad (1.82)$$

Étudiés pour la première fois par Wichmann et Kroll [25], les termes suivants d'ordre $(Z\alpha)^n$ pour $n \geq 3$ sont plus difficiles à évaluer [28, 29]. Notons que pour des raisons de symétrie (théorème de Fury), il n'existe pas de terme en $(Z\alpha)^n$ avec des puissances de n paires.

Le terme V_{21} dit de Kallen et Sabry fait partie des corrections radiatives en α^2 où deux lignes photoniques apparaissent. Nous avons regroupé sur la Figure 1.8 les diagrammes de l'ensemble des corrections d'ordre α^2 .

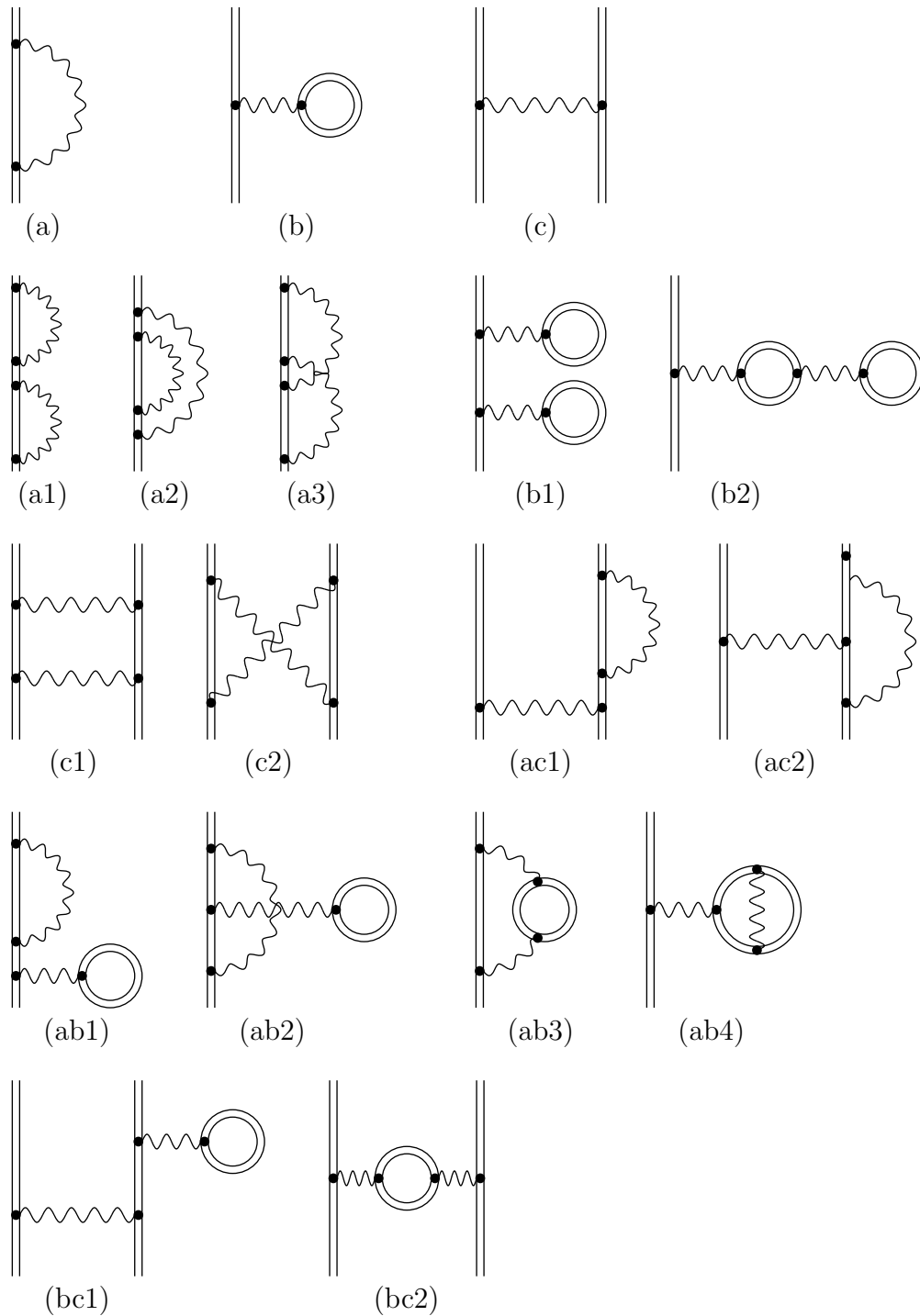


Fig. 1.8: Diagrammes des corrections radiatives d'ordre α : (a) la self-énergie ; (b) la polarisation du vide ; (c) l'interaction électron-électron et d'ordre α^2 : (a1), (a2), (a3) self-énergie ; (b1), (b2) polarisation du vide ; (c1), (c2) interaction électron-électron ; (ac1), (ac2) self-énergie et interaction électron-électron combinées ; (ab1), (ab2), (ab3), (ab4) self-énergie et polarisation du vide combinées ; (bc1), (bc2) polarisation du vide et interaction électron-électron combinées.

2. CALCUL RELATIVISTE à N-CORPS : MCDF

2.1 Introduction

Nous ne reviendrons pas sur la nécessité d'effectuer des calculs relativistes notamment dans les ions lourds pour lesquels un développement perturbatif n'est plus possible. En principe, deux méthodes permettent des calculs relativistes exacts quel que soit le système étudié. La première est la QED mais cela nécessiterait d'évaluer tous les diagrammes sans exception. Or, rapidement le calcul des diagrammes devient trop compliqué ce qui rend cette approche inutilisable en l'état. La seconde méthode serait d'utiliser une généralisation de l'équation de Bethe et Salpeter [30] aux systèmes complexes, mais actuellement nous ne saurions pas résoudre une telle équation. Tout d'abord, l'équation Bethe et Salpeter qui est relativiste donc multi-temps ne peut se mettre sous une forme Hamiltonienne sans perte d'information. Mais surtout, en théorie relativiste, la conservation de la charge et pas des particules ne permet pas d'écrire le noyau de l'équation de Bethe et Salpeter sous une forme fermée. C'est une série infinie d'équations que l'on ne sait pas résoudre, où l'équation décrivant le système à N particules contient la solution du système à $N+1$ particules. Ceci nous conduit à adopter une technique de résolution plus pragmatique : la méthode multiconfigurationnelle de Dirac-Fock (MCDF). Cette approximation est l'équivalent relativiste de la méthode de Hartree-Fock [31, 32]. Elle résout une équation aux valeurs propres à l'aide d'un principe variationnel.

Ce chapitre décrit les techniques mises en œuvre dans notre code baptisé MCDF. Nous débuterons par l'Hamiltonien et les fonctions d'onde utilisés dans le MCDF. Puis après avoir établis les équations intégro-différentielles de la méthode, nous examinerons le processus self-consistant de résolution et le modèle nucléaire choisi. Enfin nous décrirons comment introduire le calcul du premier terme de la polarisation du vide dans le processus self-consistant.

2.2 Hamiltonien Sans Paire

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, il n'est pas possible de bâtir une théorie relativiste sans postuler l'existence d'un continuum d'énergies négatives. Il apparaît alors une nouvelle physique qu'il est nécessaire d'interpréter. La formulation actuelle utilise les propagateurs de Feynman mais nous allons examiner la première description donnée par Dirac. Moins technique, elle fixe de manière simple et claire l'état d'esprit général d'une théorie avec continuum d'énergies négatives.

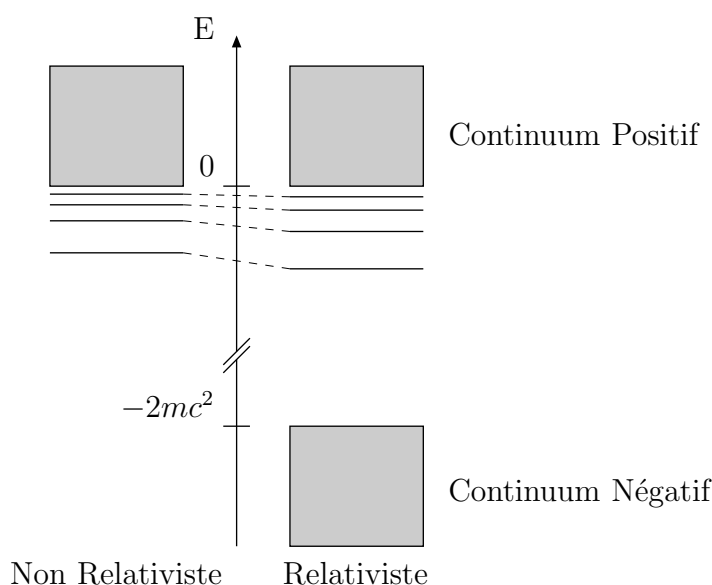


Fig. 2.1: Spectres des niveaux d'énergie d'un électron dans le champ d'un atome : classique et relativiste.

Avec le continuum négatif débutant à $\varepsilon < -2mc^2$, le spectre d'énergie d'un électron lié se trouve radicalement modifié par rapport au cas classique (Figure 2.1). Une telle modification du spectre génère inévitablement de nombreux problèmes. Par exemple pour construire les états liés d'un atome neutre dans le cas classique, on commence par placer un électron sur le niveau fondamental puis on remplit un à un les niveaux suivants à l'aide du principe d'exclusion de Pauli. Le problème est plus compliqué en relativité où les électrons ont la possibilité de tomber dans le continuum d'énergie négative puisqu'il se trouve en dessous du niveau fondamental. Il faudrait alors commencer par remplir ce continuum avec une infinité de particules avant de pouvoir obtenir un atome neutre !

Pour résoudre cette impossibilité, Dirac postule que tous les états d'énergies négatives sont déjà occupés par un électron. Ainsi, le vide est constitué d'un gaz de Fermi de densité infinie et complètement dégénéré : c'est la *mer de Dirac*. En vertu

du principe d'exclusion, tout électron supplémentaire par rapport à la mer de Dirac apparaît effectivement comme une charge d'énergie positive. Ce concept de mer de Dirac rend également compte des particules d'énergies négatives et des phénomènes de non conservation des particules. En effet, à la suite d'une fluctuation un électron de la mer de Dirac peut effectuer une transition du continuum négatif vers un état d'énergie positive. Il apparaît alors en tant qu'électron et laisse derrière lui dans le continuum négatif un *trou* de charge, d'énergie et d'impulsion opposées à l'électron. Dirac postule ainsi (trois ans avant son observation) l'existence du positron anti-particule de l'électron. La transition décrite est alors interprétée comme la création d'une particule et de son anti-particule à partir d'une fluctuation du vide. De même lorsqu'un électron vient "boucher" un trou du continuum négatif nous observons une annihilation électron-positron.

Si le concept de mer de Dirac permet de résoudre le problème lié à la construction d'un atome à un électron, il induit en revanche une sérieuse difficulté pour nos calculs d'atomes à N-corps. Ainsi, l'Hamiltonien naturel de la méthode MCDF pour un atome à deux électrons devrait être

$$H = H_D(r_1) + H_D(r_2) + g_{12} \quad (2.1)$$

avec H_D l'hamiltonien de Dirac pour une particule (1.58) et g_{12} l'interaction électron-électron en jauge de Coulomb (1.74). Or, Brown et Ravenhall [33] ont démontré que ce type d'Hamiltonien incluant l'interaction électron-électron ne pouvait pas décrire correctement les états liés à cause du continuum négatif. En effet, une paire d'électrons liés représente un état d'énergie totale $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$. En prenant une énergie dans le continuum positif et une dans le continuum négatif (Figure 2.2), on peut trouver une infinité de paires dégénérées avec l'énergie des deux électrons liés. Par l'intermédiaire de l'interaction électron-électron g_{ij} , il est alors possible de coupler les électrons liés avec les continums. Cela entraîne l'autoionisation de l'atome, ce qui est en contradiction avec la réalité puisque l'atome d'Hélium est stable.

Une possibilité pour contourner cette difficulté consiste à ré-interpréter les états d'énergies négatives comme des états d'énergies positives de positrons remontant le temps. Malheureusement il n'est pas possible de prendre en compte ce genre d'états à temps inversé dans les calculs MCDF. Une autre solution est de n'utiliser le terme g_{ij} que dans des calculs au premier ordre des perturbations. Par contre dès le deuxième ordre

$$\sum_{i,j} \frac{\langle \varepsilon_1 \varepsilon_2 | g_{12} | \varepsilon_i \varepsilon_j \rangle \langle \varepsilon_i \varepsilon_j | g_{12} | \varepsilon_3 \varepsilon_4 \rangle}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_i - \varepsilon_j} \quad (2.2)$$

avec une énergie dans chaque continuum $\varepsilon_i = \varepsilon^+$ et $\varepsilon_j = \varepsilon^-$, on a une infinité de couples $\varepsilon^+ \varepsilon^-$ susceptibles d'annuler le dénominateur. Pour obtenir une solution satisfaisante, il faut attendre la dérivation par Sucher [34] et Mittleman [35] à partir de l'électrodynamique quantique de la forme correcte de l'hamiltonien à employer. Cet hamiltonien contient un opérateur de projection destiné à éliminer les états positroniques. L'interaction électron-électron ne peut alors coupler que des états

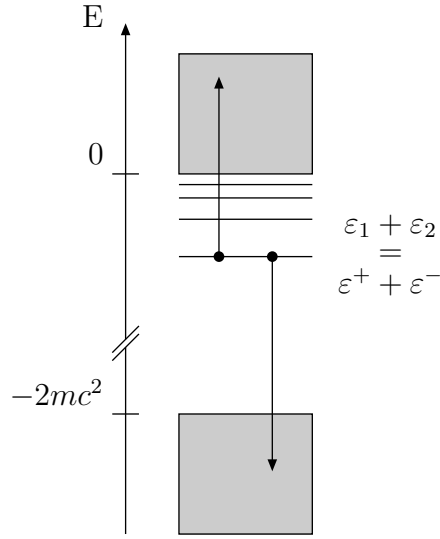


Fig. 2.2: Effet de Brown et Ravenhall.

d'énergies positives. L'idée étant qu'à priori sur des termes comme (2.2) exclure le continuum négatif correspond à négliger des termes où les $\varepsilon_i^+ + \varepsilon_j^-$ du dénominateur sont au moins $2mc^2$ (la distance entre les deux continuum) fois plus grand qu'avec $\varepsilon_i^+ + \varepsilon_j^+$.

L'hamiltonien correspondant s'appelle l'Hamiltonien *sans paire* (no-pair) et s'écrit pour N-électrons

$$H^{\text{sans paire}} = \sum_{i=1}^N H_D(r_i) + \sum_{i<j} \mathcal{G}_{ij} \quad (2.3)$$

avec H_D l'hamiltonien de Dirac à un électron et \mathcal{G}_{ij} l'opérateur projeté de l'interaction électron-électron. Il est défini par

$$\mathcal{G}_{ij} = \Lambda_{ij}^{++} g_{ij} \Lambda_{ij}^{++} \quad (2.4)$$

où l'opérateur de projection sur les états d'énergies positives $\Lambda_{ij}^{++} = \Lambda_i^+ \Lambda_j^+$ est donné par

$$\Lambda_i^+ = \sum_n |\psi_n^+(i)\rangle \langle \psi_n^+(i)| \quad (2.5)$$

avec $\psi_n^+(i)$ la fonction d'onde d'un électron (lié ou dans le continuum) d'énergie positive. L'appellation sans paire provient de ce que l'on exclut toutes les contributions des paires électron-positron.

L'utilisation d'un projecteur a fait l'objet d'une vive discussion entre spécialistes. S'il était clair que l'hamiltonien avec projecteur n'était qu'une approximation, le fait d'obtenir des résultats corrects sans projecteur incitait à ne pas l'utiliser. Les exemples de divergence des calculs étaient alors imputés aux problèmes numériques. En fait, il s'agissait de calcul dans les atomes légers pour lesquels le couplage avec

le continuum négatif était faible pour les états de n et l alors observés. En étudiant les atomes lourds, Indelicato [36, 37] a montré que les calculs sans projecteur divergent non pas pour des raisons numériques mais pour des raisons structurelles. La présence du projecteur est donc obligatoire pour assurer la convergence des calculs. En pratique, la projection dans le MCDF utilise la méthode suivante [36] : les solutions du continuum négatif sont simplement exclues des systèmes d'équations. Ceci est possible grâce à l'utilisation de bases finies de solutions obtenues à l'aide de "B splines" [38].

2.3 Fonction d'onde

La fonction d'onde atomique est obtenue en résolvant

$$H^{\text{sans paire}}\Psi_{\Pi,J,M}(\dots, \mathbf{r}_i, \dots) = E_{\Pi,J,M}\Psi_{\Pi,J,M}(\dots, \mathbf{r}_i, \dots), \quad (2.6)$$

où $\Psi_{\Pi,J,M}(\dots, \mathbf{r}_i, \dots)$ est fonction propre de la parité Π , du moment angulaire total \mathbf{J}^2 et de sa projection sur l'axe des z : J_z . Les deux derniers opérateurs ont pour valeurs propres respectives $J(J+1)$ et M . Comme dans toutes les méthodes variationnelles, on résout l'équation (2.6) en débutant avec une fonction d'essai. Dans le MCDF, cette fonction d'onde atomique d'essai est une surperposition des fonctions d'un état de configuration (Configuration State Functions : CSF)

$$|\Psi_{\Pi,J,M}\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} |\nu\Pi JM\rangle \quad (2.7)$$

où le label ν représente toutes les valeurs nécessaires différentes de Π , J et M (nombre quantique principal...) pour définir de façon univoque les CSF. Pour un système à N -électrons, les CSF sont des produits anti-symétriques des fonctions d'onde mono-électroniques ψ i.e. une combinaison linéaire de déterminants de Slater

$$|\nu\Pi JM\rangle = \sum_i d_i \begin{vmatrix} \psi_1^i(r_1) & \cdots & \psi_N^i(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^i(r_N) & \cdots & \psi_N^i(r_N) \end{vmatrix}. \quad (2.8)$$

Dans le cas relativiste, les fonctions d'onde sont les spineurs de Dirac à quatre composantes (Eq. 1.66)

$$\psi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r)\chi_{\kappa\mu}(\theta, \varphi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\chi_{-\kappa\mu}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Les coefficients d_i de l'équation (2.8) sont obtenus en imposant que les CSF soient états propres des opérateurs \mathbf{J}^2 et J_z . Tandis que $P_{n\kappa}(r)$, $Q_{n\kappa}(r)$ (grande et petite composantes) et les coefficients c_{ν} sont déterminés dans le processus variationnel décrit ci-dessous.

2.4 Équations de Dirac Fock

A l'aide de l'hamiltonien et de la base des fonctions d'onde établis dans les deux sections précédentes, nous pouvons établir les équations fondamentales de la méthode MCDF en écrivant

$$E_{\Pi,J,M} = \frac{\langle \Psi | H^{\text{sans paire}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.10)$$

On applique alors un principe variationnel à E par rapport aux coefficients c_ν et par rapport aux composantes radiales $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$ des fonctions d'onde. Dans le premier cas,

$$\frac{\partial E_{\Pi,J,M}}{\partial c_\nu} = 0 \quad (2.11)$$

est une matrice d'Hamiltonien que l'on diagonalise pour obtenir les coefficients c_ν . Le même principe variationnel appliqué aux composantes radiales conduit à un système composé d'une équation intégral-différentielle par fonctions d'onde ψ_i de la base [39, 36]

$$\begin{bmatrix} \alpha V_i(r) & \frac{\kappa_i}{r} - \frac{d}{dr} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa_i}{r} & \alpha V_i(r) - 2\frac{m}{\alpha} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} = \alpha \sum_j \varepsilon_{i,j} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} X_i^P(r) \\ X_i^Q(r) \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

où $V_i(r)$ est la somme du potentiel nucléaire et du potentiel de Coulomb direct, $(X_i^P(r), X_i^Q(r))$ sont les potentiels d'échange de la grande et de la petite composante. Le paramètre de Lagrange diagonal $\varepsilon_{i,i}$ permet de normaliser l'orbitale ψ_i ; c'est son énergie. Les paramètres de Lagrange non-diagonaux $\varepsilon_{i,j}$ sont utilisés pour forcer l'orthogonalité entre orbitales de même κ

$$\int_0^\infty [P_i(r)P_j(r) + Q_i(r)Q_j(r)] dr = \delta_{\kappa_i, \kappa_j} \delta_{n_i, n_j}. \quad (2.13)$$

Par conséquent, la sommation sur j de l'équation (2.12) ne concerne que les orbitales telles que $\kappa_j = \kappa_i$.

2.5 Processus Self-Consistant

La résolution du problème s'effectue en optimisant les coefficients de mélange c_ν ainsi que la grande et la petite composante radiale $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$ au cours d'un processus *self-consistant* (SC) en plusieurs étapes.

1. A partir de fonctions radiales $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$ hydrogénoïdes calculées avec un Z effectif ou bien obtenues par une méthode de Thomas-Fermi, on détermine avec l'équation (2.11) un première série de coefficients c_ν .

2. En maintenant constant les c_ν initiaux, on résout une à une les équations intégral-différentielles (2.12) contenant les fonctions d'onde de départ. Cela permet d'obtenir une nouvelle série de fonctions radiales. Après les avoir injectées dans le système d'équations, ce dernier est à nouveau résolu en commençant par la fonction d'onde qui a le plus varié. Ce processus se poursuit jusqu'au moment où les variations des fonctions d'onde entre deux étapes sont toutes inférieures à un seuil fixé.
3. Lorsque les fonctions d'onde sont ajustées, on recalcule alors l'ensemble des coefficients de mélange afin de les optimiser.
4. Afin d'obtenir la précision souhaitée, on recommence les deuxième et troisième étapes autant de fois que nécessaire .

Il est également utile d'examiner la manière dont on construit numériquement les fonctions radiales $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$. Nous avons déjà plusieurs contraintes sur les solutions données par la structure des fonctions d'onde (2.9). Elles sont séparables et ne dépendent pas du nombre quantique m contrairement à la partie angulaire (Dirac-Fock restreint). Elles doivent aussi être régulières à l'origine et à l'infini. Enfin, elles doivent être continues. Pour intégrer numériquement les équations différentielles, on calcule la valeur d'une fonction radiale en un point à partir des valeurs déjà connues des quelques points de la grille qui le précèdent immédiatement. Les solutions s'obtiennent en partant des deux bornes. Ainsi une des intégrations débute à l'intérieur du noyau et se propage vers l'extérieur, inversement l'autre part de l'infini et progresse vers le noyau. Pour démarrer ces deux intégrations, il nous faut estimer les valeurs de la fonction sur les premiers points. A l'origine cela est obtenu par un développement en série des fonctions et potentiels. A l'infini, les valeurs sont sélectionnées empiriquement de manière à rendre compte du comportement asymptotique des fonctions. La valeur de l'énergie n'étant pas connue au départ, fixer le comportement aux deux bornes n'assure pas le raccord entre les deux parties de la solution. C'est précisément en forçant la continuité des fonctions radiales que l'on détermine les paramètres de Lagrange et donc l'énergie ε_{ii} de l'orbitale ψ_i .

Résoudre les équations intégral-différentielles et obtenir numériquement les fonctions radiales peut poser des problèmes de convergence. C'est particulièrement le cas pour les orbitales possédant une très faible occupation effective. L'occupation effective est le produit du nombre d'électrons présents dans une orbitale par le coefficient c_ν^2 ; une orbitale avec une petite occupation effective est appelée orbitale de *corrélacion*.

2.6 Modèle Nucléaire

L'approximation d'un noyau ponctuel n'est pas satisfaisante pour les calculs des couches internes des atomes lourds ou plus généralement pour l'ensemble des orbitales s . Nous utilisons dans le MCDF deux modèles nucléaires plus réalistes.

Le premier représente la distribution de charge nucléaire par une sphère uniformément chargée de rayon R . Le potentiel nucléaire pour un atome de nombre atomique Z est alors donné par

$$V_N(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{2R} \left[3 - \frac{r^2}{R^2} \right] & \text{pour } r \leq R \\ -\frac{Z}{r} & \text{pour } r \geq R \end{cases}. \quad (2.14)$$

Le second modèle utilise une distribution de Fermi dans laquelle la densité de charge est

$$\rho_N(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp \left[\frac{r-R}{t} \right]} \quad (2.15)$$

où R est le rayon moyen sphérique de la répartition de charge, t le paramètre d'épaisseur de la distribution de Fermi et ρ_0 la constante de normalisation définie par

$$4\pi \int_0^\infty \rho_N(r) r^2 dr = Z. \quad (2.16)$$

Dans les atomes usuels, la forme de la distribution de charge du noyau devient un paramètre important seulement pour les atomes lourds. Nous utilisons en général le premier modèle pour les atomes de nombre atomique $Z \leq 45$ et la distribution de Fermi avec un paramètre d'épaisseur de $t = 2.3$ fm pour $Z > 45$.

Les rayons moyens sphériques R sont donnés par la table de la Ref. [40] sauf lorsqu'il existe une valeur plus récente ou plus précise [41, 42, 43, 44]. Pour les isotopes n'apparaissant pas dans les tables, nous avons modifié les rayons nucléaires de l'élément avec la formule [40]

$$R' - R = 0.836(A'^{1/3} - A^{1/3}) \quad (2.17)$$

où le ' représente l'isotope manquant.

2.7 Polarisation du Vide Self-consistante

Comme toutes les corrections du MCDF, la polarisation du vide est calculée au premier ordre des perturbations. Or nous désirons effectuer des calculs sur des atomes contenant un muon, un pion ou un anti-proton. Ces particules ayant une masse plus importante que l'électron, les maxima de leurs fonctions d'onde sont plus proches du noyau. En particulier, le rayon moyen des orbitales peut être du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de Compton de l'électron. Le potentiel d'Uëhling (Eq. 1.81 paragraphe 1.6.2) devient alors trop important pour être traité par une méthode perturbative. Il est nécessaire de calculer autrement la polarisation du vide.

Nous allons introduire le potentiel d'Uëhling dans le processus self-consistant. Lorsque la distribution de charge est sphérique, l'intégration angulaire permet d'obtenir l'expression [45]

$$V_{11}(r) = -\frac{2\alpha Z\alpha}{3} \frac{1}{r} \int_0^\infty r' \rho(r') [\chi_2(2|r-r'|) - \chi_2(2|r+r'|)] dr' \quad (2.18)$$

où $\rho(r) = \rho_N/Z$ la distribution de la densité de charge est normalisée par

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr = 1. \quad (2.19)$$

χ_2 appartient à une famille de fonctions données par

$$\chi_n(x) = \int_1^\infty e^{-xt} t^{-n} \left(\frac{1}{t} + \frac{1}{2t^3} \right) \sqrt{t^2 - 1} dt. \quad (2.20)$$

Nous avons également l'expression du potentiel en $r = 0$

$$V_{11}(0) = -\frac{8\alpha Z\alpha}{3} \int_0^\infty r' \rho(r') \chi_1(2r'), \quad (2.21)$$

et le développement à grande distance [27]

$$V_{11}(r) = -\frac{2\alpha Z\alpha}{3\pi} \frac{1}{r} \left[\chi_1(2r) + \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle \chi_{-1}(2r) + \frac{2}{15} \langle r^4 \rangle \chi_{-3}(2r) + \dots \right] \quad (2.22)$$

où

$$\langle r^{2n} \rangle = 4\pi \int_0^\infty r^{2n+2} \rho(r) dr \quad (2.23)$$

sont les moments de la distribution nucléaire de charge.

Pour une distribution de Fermi, nous intégrons numériquement les équations (2.21), (2.18) et (2.22). Pour plus de précision, les intégrales sont effectuées en trois fois : de 0 à $R-t$, $R-t$ à $R+t$ et de $R+t$ à l' ∞ . Ainsi, la variation rapide de la distribution de charge nucléaire entre $R-t$ et $R+t$ est correctement prise en compte.

Dans le cas d'une distribution homogène de rayon R , l'expression (2.18) peut être intégrée analytiquement [46] et nous avons

$$V_{11}(r) = -\frac{\alpha Z\alpha}{2\pi R^3} \frac{1}{r} \left[\frac{2}{5} r + \varphi(2(R+r)) - \varphi(2(R-r)) \right] \quad (2.24)$$

($r \leq R$)

$$V_{11}(r) = -\frac{\alpha Z\alpha}{2\pi R^3} \frac{1}{r} [\varphi(2(r+R)) - \varphi(2(r-R)) + R\chi_3(2(r-R))] \quad (2.25)$$

($r > R$)

avec

$$\varphi(z) = \frac{1}{2} R\chi_3(z) + \frac{1}{4} \chi_4(z). \quad (2.26)$$

De même l'équation (2.21) donne

$$V_{11}(0) = -\frac{\alpha Z \alpha}{\pi R^3} \left[\frac{1}{5} - R\chi_2(2R) - \frac{1}{2}\chi_3(2R) \right]. \quad (2.27)$$

Dans tous les cas (Fermi et homogène), les fonctions χ_n ne sont pas calculées par (2.20) mais par des expressions plus simples à évaluer numériquement. En effet, elles peuvent s'écrire sous la forme de développement en fonctions de Bessel modifiées $K_0(z)$, $K_1(z)$ et de la fonction intégrale de Bessel $Ki_1(z)$:

$$1440\chi_4(z) = (225z - 48z^3 - z^5)K_0(z) - (351z^2 - 46z^4 - z^6)K_1(z) \\ + (225 + 405z^2 - 45z^4 - z^6)Ki_1(z), \quad (2.28)$$

$$240\chi_3(z) = (33z^2 + z^4)K_0(z) + (96z - 31z^3 - z^5)K_1(z) \\ - (135z - 30z^3 - z^5)Ki_1(z), \quad (2.29)$$

$$48\chi_2(z) = -(21z + z^3)K_0(z) + (19z + z^4)K_1(z) \\ + (27 - 18z^2 - z^4)Ki_1(z), \quad (2.30)$$

$$12\chi_1(z) = (12 + z^2)K_0(z) - (10z + z^3)K_1(z) + (9z + z^3)Ki_1(z), \quad (2.31)$$

$$\chi_{-1}(z) = \frac{1}{2}K_0(z) + \left(\frac{1}{z} - \frac{z}{2} \right) K_1(z) + \frac{z}{2}Ki_1(z), \quad (2.32)$$

$$\chi_{-3}(z) = \frac{3}{z^2}K_0(z) + \left(\frac{6}{z^3} + \frac{3}{2z} \right) Ki_1(z). \quad (2.33)$$

$K_0(z)$ et $K_1(z)$ sont des fonctions évaluées à l'aide des routine du "Numérical Recipes" [47], en revanche nous calculons $Ki_1(z)$ par

$$Ki_1(z) = \int_z^\infty K_0(x)dx = Ki_1(0) - \int_0^z K_0(x)dx \quad (2.34)$$

et avec [48]

$$\int_0^z K_0(x)dx = - \left(\gamma + \ln \frac{x}{2} \right) x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2k}}{(k!)^2(2k+1)} \\ + x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2k}}{(k!)^2(2k+1)^2} \\ + x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(x/2)^{2k}}{(k!)^2(2k+1)} \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{k} \right) \quad (2.35)$$

où $\gamma = 0.57721\dots$ est la constante d'Euler.

Introduire le potentiel d'Uëhling dans le processus self-consistant permet, quel que soit le calcul (atome exotique ou non), d'inclure tous les diagrammes y compris ceux d'ordre supérieur à α de type boucle simple sur la fonction d'onde (Figure 2.3)

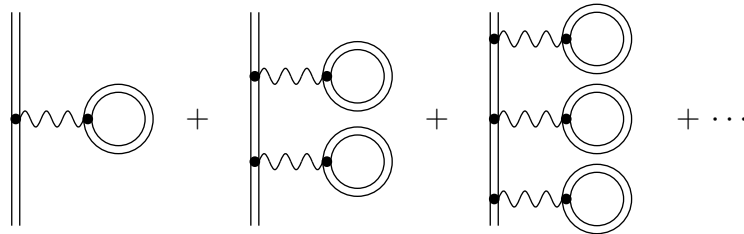


Fig. 2.3: Diagrammes calculés lorsque le potentiel d'Uëhling est inclu dans le processus self-consistant

3. STRUCTURE HYPERFINE DANS LES LITHIUMOIDES

3.1 Introduction

Les atomes peuvent posséder un spin nucléaire non nul. La structure hyperfine (Hfs) est la séparation des niveaux d'énergie atomique en plusieurs sous niveaux par suite de l'interaction magnétique des électrons du cortège avec le spin du noyau. On observe alors l'apparition de nouvelles transitions. A partir de ce véritable pont établi entre la physique nucléaire et la physique atomique, il devient possible par la mesure des transitions hyperfines d'obtenir un certain nombre d'informations sur le noyau. Par exemple, c'est le cas de la déduction par Fermi [49] des valeurs du moment magnétique nucléaire suite à la mesure des structures hyperfines du Cs et du Na. L'étude de la séparation hyperfine est également un outil important permettant de tester la théorie, en particulier d'acquérir une meilleure compréhension de la partie magnétique des effets d'électrodynamique quantique (QED). Par exemple, dans un atome comme l'hydrogène les calculs sont relativement simples et peuvent être aisément comparés à la grande précision des mesures.

Aujourd'hui encore, les mesures spectroscopiques les plus précises sont celles de la transition hyperfine à 1.4 Ghz de l'hydrogène, correspondant à une longueur d'onde de 21 cm [50]. Malheureusement dans H, les effets de QED sont de l'ordre de 10^{-5} à 10^{-6} par rapport à la transition totale. Il sont donc petits ce qui n'en facilite pas l'étude théorique. Il était alors naturel de s'intéresser aux ions lourds fortement chargés dans lesquels les électrons soumis à des champs électriques et magnétiques particulièrement intenses induisent des corrections de QED de l'ordre de quelques pour-cents. Dans de tels atomes, les calculs restent relativement simples en particulier du point de vue de la QED. Pour les ions hydrogénoïdes, il s'agit de résoudre l'équation de Dirac puis d'ajouter les effets dus à la taille finie du noyau et les corrections de QED. Dans les ions possédant plus d'un électron, il faut également prendre en compte les corrélations électroniques. Autre avantage des ions lourds, le recouvrement important des fonctions d'onde nucléaires et électroniques les désignent directement pour une meilleure étude des effets de la structure nucléaire que sont : la distribution de la charge nucléaire (Effet Bohr-Rosenthal []) et la répartition du moment magnétique nucléaire (Effet Bohr-Weisskopf [51]). Malgré ces potentialités, deux difficultés majeures interdisaient l'étude des transitions hyperfines des ions de

Z élevé : 1) la production et le confinement suffisant d'un ensemble d'ions fortement chargés pour permettre une mesure précise ; 2) la séparation Hfs croît en Z^3 , et de ce fait, on sort rapidement du domaine de spectroscopie micro-onde utilisée pour la mesure des transitions de l'hydrogène.

Depuis peu, grâce à l'utilisation des anneaux de stockage de haute énergie [52, 53] et aux trappes d'ions (super-EBIT) [54, 55], il est possible d'observer les transitions hyperfines des états liés d'ions lourds. Deux techniques différentes ont déjà permis d'obtenir des résultats pour des ions hydrogénéoïdes. Le $^{209}\text{Bi}^{82+}$ [52] et le $^{207}\text{Pb}^{81+}$ [53] ont été étudiés sur l'anneau de stockage (ESR) de GSI à Darmstadt grâce à une technique de détection de fluorescence induite par laser. En balayant les fréquences avec le laser, la fluorescence apparaît lorsque l'on se trouve en résonance avec la transition hyperfine. C'est une spectroscopie de grande précision qui se situe dans le domaine optique ou infra-rouge. En effet, à cause de la vitesse des ions dans l'anneau, les énergies de transitions sont décalées par effet Doppler vers ces régions. C'est d'ailleurs la mesure du décalage (vitesse des particules) qui limite la précision de cette technique. La principale contrainte est la nécessité de connaître précisément l'énergie de résonance afin de limiter l'étendue du balayage. La deuxième technique avec laquelle ont été observés $^{165}\text{Ho}^{66+}$ [54] et deux isotopes $^{185}\text{Re}^{74+}$ et $^{187}\text{Re}^{74+}$ [55] est développée sur la trappe d'ion super-EBIT du Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL). Les transitions sont excitées par collision avec un faisceau d'électrons et sont mesurées après émission spontanée. Cette technique relativement simple permet en principe la spectroscopie dans le domaine des X d'un grand nombre d'ions lourds hydrogénéoïdes. De même il y a quelques mois, elle a permis à l'équipe du LLNL d'effectuer de manière indirecte la première mesure sur un ion lithiumoïde le $^{209}\text{Bi}^{80+}$ [56].

Stimulés par ces nouveaux résultats expérimentaux, nous avons calculé par la méthode de Multi-Configurations Dirac Fock (MCDF) exposée au chapitre précédent les transitions hyperfines du fondamental pour l'ensemble des ions lithiumoïdes. Ces calculs à plusieurs corps nous permettent d'étudier l'importance des différentes corrections que sont les corrélations Coulombiennes, les corrélations de Breit et le continuum négatif. Par ailleurs, afin de pouvoir interpréter les mesures en terme de test de la QED, il est important de bien différencier les effets nucléaires type Bohr-Weisskopf de la QED. Nous avons donc aussi calculé la séparation hyperfine des ions hydrogénéoïdes afin d'étudier et de comparer avec les expériences récentes la qualité de notre estimation de Bohr-Weisskopf. Comparer les transitions hyperfines entre le niveau $1s$ d'un ion hydrogénéoïde et le niveau $2s$ du même ion (même Z et A) mais lithiumoïde est également une source d'information pour distinguer entre Bohr-Weisskopf et les corrections de QED (voir Shabaev et al. [57]).

Nous commencerons ce chapitre par les principes de calcul de la structure hyperfine. Puis nous comparerons les transitions hydrogénéoïdes avec les résultats expérimentaux afin d'évaluer l'estimation de notre correction de Bohr-Weisskopf. Dans une troisième partie, nous étudierons l'importance des différentes corrections dans les ions lithiumoïdes. Enfin nous conclurons par une discussion sur ces résultats.

3.2 Calcul de la Structure Hyperfine

La structure hyperfine résulte de l'interaction entre le moment magnétique nucléaire et le moment angulaire total des électrons constituant le cortège atomique. Seuls les atomes possédant un spin nucléaire non nul sont donc concernés. L'Hamiltonien relativiste hyperfin peut être représenté par un développement en multipôles

$$H_{hfs} = \sum_k \mathbf{M}^k \cdot \mathbf{T}^k, \quad (3.1)$$

où \mathbf{M}^k et \mathbf{T}^k sont des tenseurs sphériques de rang k , représentant respectivement la partie nucléaire et électronique de l'interaction [58]. Seul le terme dipolaire électrique $k = 1$ existe car nous ne considérons que les états fondamentaux des ions hydrogénoïdes et lithumioïdes soit des orbitales $1s$ et $2s$ ¹. Par conséquent, l'élément de matrice hyperfin $W_{J,J'}$ s'écrit

$$W_{J,J'} = \langle I, J, F, M_F | \mathbf{M}^1 \cdot \mathbf{T}^1 | I, J', F, M_F \rangle, \quad (3.2)$$

où I est le spin nucléaire, J (ou J') le moment angulaire total d'une configuration électronique et F le moment angulaire total de l'atome. Nous pouvons également écrire l'équation (3.2) en fonction des éléments de matrice réduits (Ref. [59] ou Annexe B.4)

$$W_{J,J'} = (-1)^{I+J+F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F \\ J' & I & k \end{array} \right\} \langle I || \mathbf{M}^1 || I \rangle \langle J || \mathbf{T}^1 || J' \rangle. \quad (3.3)$$

Le moment magnétique nucléaire μ_I est traditionnellement défini en unité de magnéton nucléaire μ_N soit

$$\mu_I \mu_N = \langle II | \mathbf{M}_0^1 | II \rangle = \left(\begin{array}{ccc} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{array} \right) \langle I || \mathbf{M}^1 || I \rangle, \quad (3.4)$$

avec $\mu_N = e\hbar/(m_p c)$ et le symbole $3j$ donné par (Annexe B.2)

$$\left(\begin{array}{ccc} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{array} \right) = \sqrt{\frac{I}{(2I+1)(I+1)}}. \quad (3.5)$$

L'opérateur atomique \mathbf{T}_q^1 peut être décomposé en somme d'opérateurs à un

¹ D'après l'équation (3.8), les éléments de matrices de \mathbf{T}^k sont proportionnels au symbole $3j$

$$\left(\begin{array}{ccc} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{array} \right).$$

Or pour un électron $1s$ ou $2s$: $j = j' = 1/2$, d'où l'inégalité triangulaire $|j - j'| \leq k \leq (j + j')$ implique que tous les termes $k \geq 2$ sont nuls (voir Annexe B.2).

électron \mathbf{t}_q^1 [58], soit

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_q^1 &= \sum_{e^-} \mathbf{t}_q^1 \\ &= \sum_j -ie\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{Y}_{1q}^{(0)}(\hat{\mathbf{r}}_j)}{r_j^2},\end{aligned}\quad (3.6)$$

dans laquelle $\boldsymbol{\alpha}$ est la matrice de Dirac, $\mathbf{Y}_{1q}^{(0)}(\hat{\mathbf{r}}_j)$ est l'harmonique sphérique vectorielle [9] et où j représente le $j^{\text{ème}}$ électron de l'atome. L'expression explicite des éléments de matrices de \mathbf{t}_q^1 est donnée dans l'article de K. T. Cheng et W. J. Childs [60] et est

$$\langle \kappa m | \mathbf{t}_q^1 | \kappa' m' \rangle = -\langle -\kappa m | \mathbf{C}_q^1 | \kappa' m' \rangle (\kappa + \kappa') [r^{-2}]_{\kappa\kappa'} \quad (3.7)$$

où κ (κ') est le nombre quantique angulaire et m (m') sa composante sur z . On rappelle que $\kappa = \mp(j + 1/2)$ pour $j = l \pm 1/2$ avec l et j les moments angulaires orbital et total d'un électron. La partie angulaire en \mathbf{C}_q^1 où $\mathbf{C}_q^k = \sqrt{4\pi/(2k+1)}Y_{kq}$ avec Y_{kq} harmonique sphérique (Annexe B.5) est donnée d'une manière générale pour k quelconque par

$$\langle \kappa m | \mathbf{C}_q^k | \kappa' m' \rangle = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle \kappa || \mathbf{C}^k || \kappa' \rangle, \quad (3.8)$$

$$\langle \kappa || \mathbf{C}^k || \kappa' \rangle = (-1)^{j+\frac{1}{2}} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \pi_{l,k,l'}, \quad (3.9)$$

$$\pi_{l,k,l'} = \begin{cases} 1 & \text{si } l+k+l' \text{ est pair} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (3.10)$$

et la partie radiale par

$$[r^k]_{n\kappa n'\kappa'} = \int_0^\infty r^k (P_{n\kappa}(r)Q_{n'\kappa'}(r) + Q_{n\kappa}(r)P_{n'\kappa'}(r))dr. \quad (3.11)$$

L'opérateur \mathbf{T}_q^1 ainsi défini n'est valable que pour une distribution ponctuelle du moment magnétique du noyau. Afin de prendre en compte l'extension spatiale de cette distribution (effet Bohr-Weisskopf), nous utilisons le formalisme exposé dans la Ref. [61] pour le calcul de l'anomalie hyperfine des atomes muoniques. La correction de Bohr-Weisskopf est alors obtenue en remplaçant dans l'expression de l'hamiltonien hyperfin l'équation (3.11) par

$$[r^k]_{n\kappa n'\kappa'}^{BW} = \int_0^{R_{nuc}} \boldsymbol{\rho}_{Mag}(s) \int_0^s r^k (P_{n\kappa}(r)Q_{n'\kappa'}(r) + Q_{n\kappa}(r)P_{n'\kappa'}(r))dr s^2 ds, \quad (3.12)$$

avec R_{nuc} le rayon de la distribution du moment magnétique nucléaire et $\boldsymbol{\rho}_{Mag}$ la densité de moment magnétique

$$\int_0^\infty \boldsymbol{\rho}_{Mag} r^2 dr = \mathbf{M}. \quad (3.13)$$

Compte tenu du peu d'information sur le noyau, nous faisons comme hypothèse qu'il est possible d'utiliser les mêmes modèles de distribution uniforme ou de Fermi que ceux choisis pour la répartition de la charge nucléaire et nous prenons le même rayon moyen sphérique :

$$r_{charge} = r_{magnétique}. \quad (3.14)$$

3.3 Transitions Hyperfines dans les Ions Hydrogénoïdes

Avant d'étudier le ions lithiumoïdes, il est nécessaire d'acquérir plus d'informations sur les propriétés magnétiques du noyau. La valeur du moment magnétique nucléaire et la distribution de ce moment magnétique (effet Bohr-Weisskopf) sont des éléments influant fortement sur les calculs des transitions hyperfines. Par exemple à haut Z , Bohr-Weisskopf est une correction qui modifie la séparation hyperfine de quelques pour-cents. En comparant nos calculs de transitions hyperfines dans les ions hydrogénoïdes avec les transitions mesurées, nous pouvons estimer la qualité de notre évaluation pour Bohr-Weisskopf. Nous pouvons également tenter de déterminer la valeur correcte du moment magnétique nucléaire lorsqu'il y a ambiguïté. Enfin, ces calculs nous seront utiles pour réduire l'incertitude sur la correction de Bohr-Weisskopf dans les lithiumoïdes par la méthode de Shabaev.

Nous donnons dans la Table 3.2 en fin de section la liste détaillée des résultats classés par éléments en fonction du numéro atomique Z puis du nombre de masse A . Il ne peut y avoir de structure hyperfine que pour un spin nucléaire I non nul, nous rappelons la valeur de celui-ci pour chaque noyau. Nous indiquons également les moments magnétiques nucléaires μ_I utilisés pour les calculs. Sauf mention contraire, ils proviennent de la table de Raghavan [62]. Lorsqu'il y a ambiguïté sur le moment magnétique, nous effectuons un calcul pour chaque valeur proposée. Bien évidemment nous avons séparé la partie transition purement hyperfine ΔE_H^{Hfs} de l'effet de Bohr-Weisskopf ΔE_H^{BW} que nous souhaitons étudier. La transition hyperfine ΔE_H^{Hfs} contient déjà la polarisation du vide sur la fonction d'onde VP_H^{SC} due à l'introduction du potentiel d'Uëhling dans le processus self-consistant (voir chapitre précédent). Pour la QED, il nous faut encore ajouter la polarisation du vide VP_H^{Hfs} [63] et la self énergie SE_H [64]. Les transitions finales ΔE_H sont exprimées en eV et en longueur d'onde λ_H . On peut retrouver l'ensemble de ces transitions en fonction du numéro atomique Z sur la figure 3.16 située en fin de chapitre.

Dans la Table 3.1, nous comparons nos résultats et quelques autres prédictions théoriques avec les transitions hyperfines mesurées. D'un manière générale, nous observons un bon accord entre nos calculs et les raies expérimentales.

Pour $^{165}\text{Ho}^{66+}$, nous avons le choix entre deux moments magnétiques : la première valeur $\mu_I = 4.132(5) \mu_N$ est établie par Nachtsheim [65] et est retenue dans la com-

pilation de Peker [66] ; la seconde $4.173 \mu_N$ provient du Raghavan [62]. En calculant la transition avec ces deux valeurs, nous obtenons par rapport à la transition mesurée des écarts respectifs de -0.2% et $+0.79\%$. Nous avons regroupé sur la Figure 3.1 l'ensemble des écarts à la mesure expérimentale résultant des différents calculs. Les résultats sont cohérents entre eux et nous permettent de retenir $\mu_I = 4.132 \mu_N$ comme valeur du moment magnétique de ^{165}Ho .

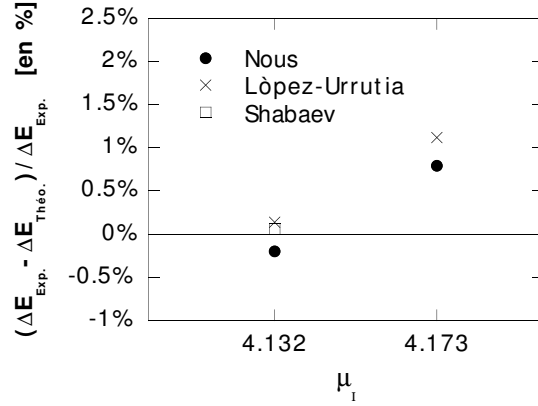


Fig. 3.1: Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{165}\text{Ho}^{66+}$. Les valeurs de López-Urrutia et de Shabaev correspondent respectivement aux Ref. [54] et [67].

Nous retrouvons le même problème de choix pour le plomb avec deux valeurs du moment magnétique citées dans la Ref. [62]. Notre calcul diffère de $+0.4\%$ par rapport à la transition avec $\mu_I = 0.58219 \mu_N$ et de $+2.21\%$ pour $0.592583 \mu_N$. Ces deux résultats sont respectivement confirmés (Fig. 3.2) par deux calculs indépendants [53, 68]. De même, dans un premier calcul [69], en utilisant une moyenne des moments magnétiques donnés par Raghavan $\mu_I = 0.587 \mu_N$, Shabaev trouve une transition de 1.219 eV soit un écart de $+0.27\%$. Ces calculs compatibles avec nos résultats nous orientent vers un moment magnétique de $0.58219 \mu_N$. Mais récemment, après avoir réévalué sa correction de Bohr-Weisskopf, Shabaev effectue un second calcul [67] donnant un écart de -0.05% pour $0.592583 \mu_N$. Du fait de cette contradiction, nous ne pouvons trancher entre les deux valeurs proposées.

Pour les autres ions : le Re 185, le Re 187 et le Bi, nous obtenons un accord satisfaisant entre nos calculs et les transitions mesurées avec des écarts respectifs de $+0.80\%$, $+0.85\%$ et -0.60% (Fig. 3.3 et 3.4).

[eV]	$^{165}\text{Ho}^{66+}$				
	nous	[54]	[67]	nous	[54]
μ_I [μ_N]	4.132	4.132	4.132	4.173	4.173
Premier ordre	2.1953		2.1957	2.2171	2.1987
Bohr-Weisskopf	-0.0247		-0.0195	-0.0249	
Polarisation du vide (VP)					
sur la fonction d'onde (VP SC)	0.0063		0.0064	0.0064	0.0064
sur l'interaction Hfs (VP Hfs)	0.0029		0.0030	0.0030	0.0030
Total pour VP	0.0093	0.0094	0.0094	0.0094	0.0094
Self-énergie (SE Hfs)	-0.0196	-0.0193	-0.0197	-0.0198	-0.0193
Total de la QED	-0.0104	-0.0099	-0.0103	-0.0105	0.0099
Total	2.1602	2.1675	2.1659(66)	2.1817	2.1888
Expérience [54]	2.1645(6)				
Différence Exp.-Tot.	0.0043	-0.003	-0.0014	-0.0172	-0.0243

[eV]	$^{185}\text{Re}^{74+}$		$^{187}\text{Re}^{74+}$
	nous	[67]	nous
μ_I [μ_N]	3.1871	3.1871	3.2197
Premier ordre	2.7981	2.7977	2.8262
Bohr-Weisskopf	-0.0429	-0.0341	-0.0434
Polarisation du vide (VP)			
sur la fonction d'onde (VP SC)	0.0103	0.0105	0.0104
sur l'interaction Hfs (VP Hfs)	0.0043	0.0044	0.0044
Total pour VP	0.0146	0.0149	0.0148
Self-énergie (SE Hfs)	-0.0290	-0.0290	-0.0293
Total de la QED	-0.0144	-0.0141	-0.0145
Total	2.7408	2.749(10)	2.7683
Expérience [55]	2.719(2)		2.745(2)
Différence Exp.-Tot.	-0.0218	-0.030	-0.0233

Tab. 3.1: Comparaison entre les différents calculs théoriques et les mesures expérimentales.

[eV]	$^{207}\text{Pb}^{81+}$				
	nous	[53]	nous	[68]	[67]
μ_I [μ_N]	0.58219	0.58219	0.592583	0.592583	0.592583
Premier ordre	1.2529	1.2566	1.2754	1.2752(2)	1.2751
Bohr-Weisskopf	-0.0252	-0.0400	-0.0257	-0.0340	-0.0534
Polarisation du vide (VP)					
sur la fonction d'onde (VP SC)	0.0057		0.0058	0.0061	0.0059
sur l'interaction Hfs (VP Hfs)	0.0022		0.0022	0.0022	0.0023
Total pour VP	0.0079	0.0082	0.0080	0.0083	0.0082
Self-énergie (SE Hfs)	-0.0147	-0.0142	-0.0150	-0.0148	-0.0150
Total de la QED	-0.0068	-0.0060	-0.0069	-0.0065	-0.0068
Total	1.2208	1.2105(24)	1.2427	1.2347	1.215(5)
Expérience [53]	1.2159(2)				
Différence Exp.-Tot.	-0.0049	0.0054	-0.0268	-0.0188	-0.0009

[eV]	$^{209}\text{Bi}^{82+}$		
	nous	[67]	[68]
μ_I [μ_N]	4.1106	4.1106	4.1106
Premier ordre	5.1908	5.1906	5.1917(10)
Bohr-Weisskopf	-0.1087	-0.0612	-0.107(7)
Polarisation du vide (VP)			
sur la fonction d'onde (VP SC)	0.0243	0.0250	0.0253
sur l'interaction Hfs (VP Hfs)	0.0093	0.0093	0.0093
Total pour VP	0.0335	0.0343	0.0346
Self-énergie (SE Hfs)	-0.0619	-0.0621	-0.0614
Total de la QED	-0.0284	-0.0278	-0.0268
Total	5.0537	5.101(27)	5.058(8)
Expérience [52]	5.0840(8)		
Différence Exp.-Tot.	0.0303	-0.017	-0.026

Tab. 3.1: (Suite)

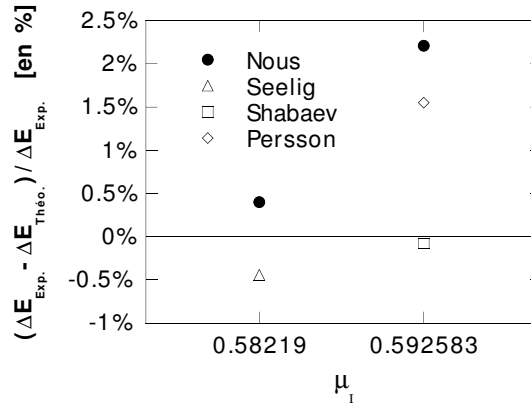


Fig. 3.2: Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{207}\text{Pb}^{81+}$. Les valeurs de Seelig, de Shabaev et de Persson correspondent respectivement aux Ref. [53], [67] et [68].

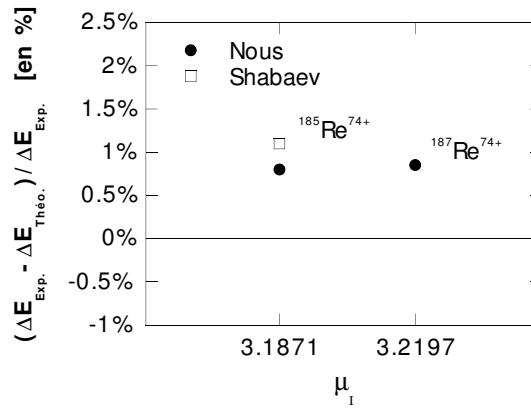


Fig. 3.3: Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{185}\text{Re}^{74+}$ et $^{187}\text{Re}^{74+}$. Les valeurs de Shabaev correspondent à la Ref. [67].

On peut constater dans la Table 3.1 que la différence essentielle entre les calculs provient de la correction de Bohr-Weisskopf. La distribution du moment magnétique nucléaire est mal connue et le calcul de Bohr-Weisskopf est très dépendant du modèle nucléaire choisi. La plupart des calculs [69, 67] sont basés sur le modèle à une particule développé par Bohr et Weisskopf [51]. La totalité du moment magnétique est alors portée par le nucléon impair. D'autres calculs plus complexes prennent en compte les corrélations entre les fonctions d'onde des nucléons [70, 71]. Pour le moment l'accord entre ces différents modèles n'est pas bon. Nos calculs utilisent une distribution homogène (uniforme ou de Fermi) du moment magnétique nucléaire et le rayon moyen sphérique employé est celui de la distribution de charge. Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, nos calculs décrivent aussi bien les transitions mesurées que ceux utilisant un modèle plus sophistiqué. La correction de Bohr-Weisskopf est donc raisonnablement évaluée avec notre distribution homogène du

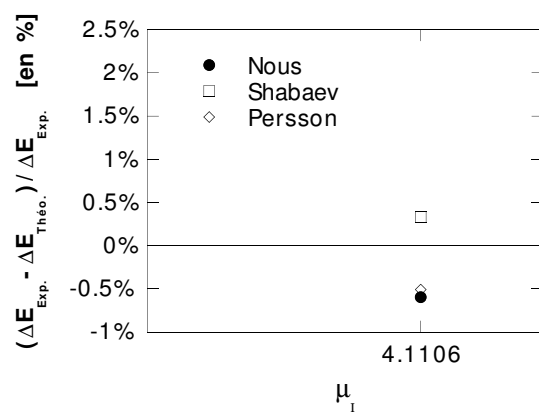


Fig. 3.4: Écart relatif entre la raie expérimentale et les différents calculs de raies théoriques pour $^{209}\text{Re}^{82+}$. Les valeurs de Shabaev et de Persson correspondent respectivement aux Ref. [67] et [68].

moment magnétique.

3.4 Transitions Hyperfines dans les Ions Lithiumoïdes

La structure hyperfine des ions hydrogénoïdes nous permet de mieux comprendre la partie magnétique de la QED. Cependant l'ensemble des effets à plusieurs corps reste par définition inaccessible. Afin de pouvoir les étudier, nous avons calculé les transitions hyperfines des ions lithiumoïdes. Nous souhaitons en particulier examiner l'influence des nouvelles corrections : corrélations coulombiennes, magnétiques et l'effet du continuum négatif.

Les résultats sont regroupés dans la Table 3.6. Cette table est similaire à celle présentée pour les hydrogénoïdes (Table 3.2). Comme précédemment, nous avons donc séparé la partie structure hyperfine ΔE_{Li}^{Hfs} de la correction de Bohr-Weisskopf ΔE_{Li}^{BW} . Ceci permet de substituer à notre calcul une autre évaluation de cette correction si nécessaire. ΔE_{Li}^{Hfs} et ΔE_{Li}^{BW} incluent toutes les corrections dues aux effets à plusieurs corps ainsi que la partie fonction d'onde de la polarisation du VP_H^{SC} . La partie boucle de la polarisation du vide VP_{Li}^{Hfs} [63], la self énergie SE_{Li} [64], la transition finale ΔE_{Li} en eV et en longueur d'onde λ_{Li} conservent la même signification que dans la table des hydrogénoïdes.

La seule mesure actuellement disponible de transition hyperfine pour des ions lourds lithiumoïdes est celle du $^{209}\text{Bi}^{80+}$ effectuée récemment à Livermore [56]. Aussi, pour étudier l'influence des corrections dues aux effets à plusieurs corps, nous allons nous appuyer sur le calcul de la transition du Bi^{80+} . La décomposition complète du calcul est présentée dans la Table 3.3. Nous laissons pour le moment la correction de Bohr-Weisskopf sur laquelle nous reviendrons dans la discussion du paragraphe 3.5.

3.4.1 Premier Ordre

Notre premier ordre est l'énergie de la transition hyperfine calculée avec l'Hamiltonien hyperfin de l'Eq. (3.1) et une fonction d'onde composée d'une seule configuration ($1s^22s$). Il contient la contribution de Coulomb (Eq. (1.75) du Chapitre 1) qui est toujours incluse dans le processus self-consistant. En revanche la contribution magnétique (1.76) et le terme de retard (1.77) calculés au premier ordre des perturbations sont sans effet sur la structure hyperfine.

3.4.2 Corrélations

On appelle corrélation la différence entre un calcul multi-configurationnel et le calcul effectué avec une fonction d'onde composée d'une seule configuration. En ajoutant des configurations, on agrandit l'espace variationnel ce qui accroît la précision

$^{209}\text{Bi}^{80+}$	
Premier Ordre	807.046
Bohr-Weisskopf	-18.675
Corrélations Coulombiennes	7.222
Corrélations Magnétiques (1)	1.212
Continuum négatif (2)	0.416
Part non additive entre (1) et (2)	-0.358
Polarisation du vide sur les fonctions d'onde	4.131
Polarisation du vide sur l'interaction hfs	1.440
Self-énergie	-9.631
Total	792.804
Expérience [56]	821(26)

Tab. 3.3: Décomposition du calcul complet pour $^{209}\text{Bi}^{80+}$ (en meV).

Configurations pour le niveau $1s^2 2s$ (LS)	Nombre de configurations jj
$1s^2 2s$	1
$1s 2s 3s$	2
$2s 3s^2$	1
$1s 3s^2$	1
$1s 2p 3p$	6
$2s 2p^2$	3
$1s 3p^2$	3
$1s 2p^2$	3
$2s^2 3s$	1
$2s 3p^2$	3
$1s 3d^2$	3
$2s 3d^2$	3
$1s 2s^2$	1
$2s 2p 3p$	6
$1s^2 3s$	1
$1s 2s 3d$	1
$1s 3s 3d$	1
$3s 3d^2$	3
$3d^3$	2
$3p^2 3d$	5
$2s 3s 3d$	1
$3s 3p^2$	3
Nombre total (jj)	54

Tab. 3.4: Liste des configurations incluses dans le calcul de l'énergie de corrélation.

des résultats. Pour inclure les corrélations dans MCDF, nous utilisons une fonction d'onde totale composée de toutes les configurations provenant de toutes les combinaisons possibles d'orbitales ayant pour nombre quantique principal $n = 1$ à 3 . Rappelons que ces configurations dites de *corrélation* doivent posséder la même parité Π et le même moment angulaire total j que la configuration calculée. Pour le niveau fondamental des ions lithiumoïdes $1s^22s$, cela représente en tout 22 configurations en couplage ls et 54 en couplage jj . La liste complète est donnée dans la Table 3.4.

Les corrélations proviennent à la fois de la partie Coulomb de l'interaction électron-électron et de la partie magnétique (Gaunt).

Coulombiennes

Avec l'interaction de Coulomb dans le processus self-consistant et un calcul multi-configurationnel, cela permet d'inclure de plus en plus de termes représentés par des diagrammes en *échelle*. Le nom d'échelle provient de la représentation caractéristique de cette approximation (Figure 3.5). On utilise les conventions de la Figure 1.5 (page 32) pour différencier les lignes photoniques d'origine coulombienne ou magnétique, i.e., une ligne pleine pour la partie Coulomb, une ligne hachurée pour Gaunt et une onde hachurée pour le retard.

Le premier diagramme de la Figure 3.5 étant déjà inclus dans le terme du premier ordre, la correction *Corrélations Coulombiennes* de la Table 3.3 correspond aux diagrammes suivants de la figure.

Nous avons calculé le déplacement de l'énergie hyperfine dû à la partie Coulombienne de l'interaction électron-électron en fonction du nombre atomique Z . L'effet est très important à bas Z et décroît fortement en $1/Z$ (Figure 3.6). Il représente plus de 25% de la séparation hyperfine dans le ${}^7\text{Li}^{0+}$, pour moins de 0.8% dans le ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$.

En les ajoutant une à une, nous pouvons étudier la contribution de chaque configuration aux calculs des corrélations. L'influence relative d'une configuration donnée varie peu en fonction de Z . L'essentiel de la correction provient de la configuration $1s2s3s$ $j = 1/2$ qui induit à elle seule plus de 99% des corrélations pour les $Z \geq 45$ (Figure 3.7). Cette caractéristique importante des ions lithiumoïdes permet d'obtenir une bonne évaluation des corrélations coulombiennes en utilisant une base de configurations réduite.

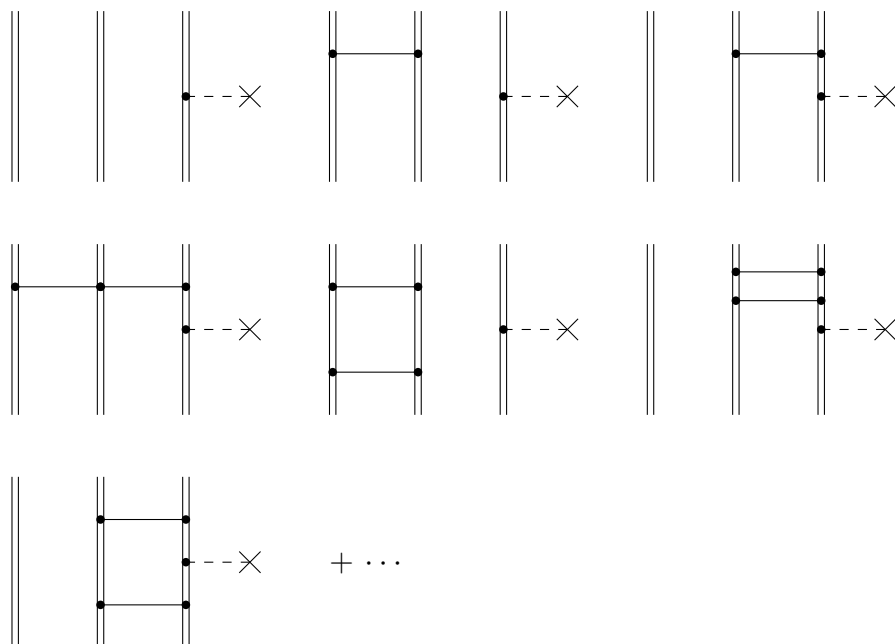


Fig. 3.5: Diagrammes de Feynman pour l'approximation en échelle de la partie Coulomb de l'interaction électron-électron.

Magnétiques

Pour obtenir la contribution à l'énergie de corrélation des effets magnétiques, nous allons introduire l'interaction de Gaunt dans le processus self-consistant. En revanche, on continue de traiter le terme de retard au premier ordre des perturbations car il contient la fréquence ω_{12} proportionnelle à la différence $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ (Eq. 1.72). Pour la configuration étudiée les ε calculés dans le processus self-consistant correspondent aux énergies des électrons entre lesquels a lieu l'interaction. Par contre, pour les configurations de corrélations les ε calculés sont des paramètres de Lagrange qui n'ont aucun rapport avec les énergies auxquelles serait liée la fréquence du photon échangé (Cf. les paramètres de Lagrange diagonaux et non-diagonaux section 2.4 et 2.5 du chapitre 2).

Introduire Gaunt dans le processus self-consistant entraîne deux types de contributions nouvelles aux calculs des corrélations. Nous les appelons *Corrélations Magnétiques*. Premièrement, comme dans la partie coulombienne nous ajoutons tout une série de diagrammes en échelle (Figure 3.8(a)). Deuxièmement, nous ajoutons une série de nouveaux diagrammes (Figure 3.8(b)) de types croisés entre Coulomb et Gaunt.

L'évolution des corrélations magnétiques en fonction de Z apparaît sur la Figure 3.10. Elles croissent avec Z mais restent faibles puisqu'elles représentent moins de

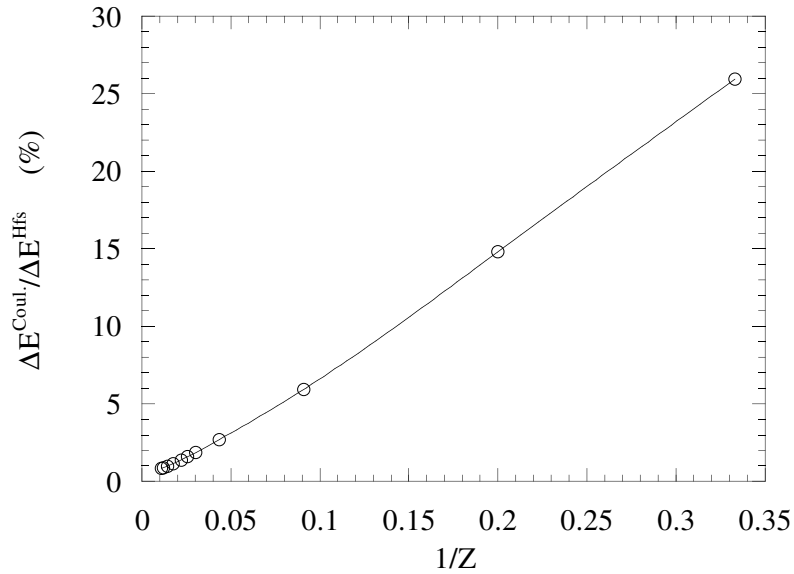


Fig. 3.6: Pourcentage de la part des corrélations coulombiennes dans la transition hyperfine totale en fonction de $1/Z$.

0.2% de la transition hyperfine pour les ions lourds.

3.4.3 Continuum Négatif

Dans le MCDF, la structure hyperfine est un opérateur à un corps qui est traité au premier ordre de la théorie des perturbations. Cela autorise l'absence de projecteur ce qui modifie les fonctions d'onde déterminées dans le processus self-consistant. La correction *Continuum Négatif* correspond à la différence entre un calcul avec projecteur et sans projecteur. L'apparition des états du continuum négatif modifie les calculs de la structure hyperfine par l'intermédiaire des diagrammes en échelle où deux barreaux encadrent l'interaction avec le noyau. En effet ces termes inclus des diagrammes avec états d'énergies positives (premier diagramme de la Figure 3.9) mais aussi des diagrammes contenant un état d'énergie négative (deuxième diagramme de la Figure 3.9). Les calculs intermédiaires de ce type d'opérateur non-local sont fortement dépendent de la jauge. L'influence du continuum négatif peut alors être importante sur les premiers termes du développement.

La part de la correction Continuum Négatif dans la structure hyperfine est très faible avec moins de 0.05% de la transition totale quel que soit Z .

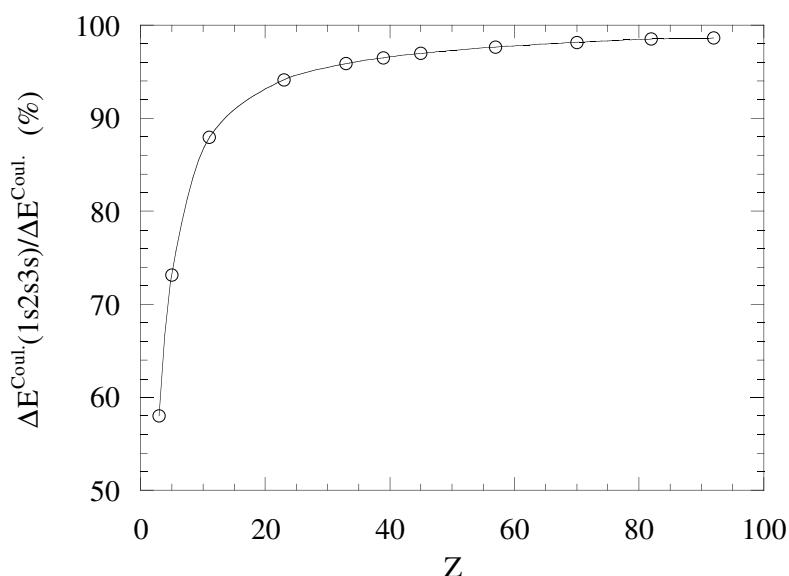


Fig. 3.7: Part relative en % de la contribution de la configuration (1s 2s 3s) par rapport aux corrélations coulombiennes totales

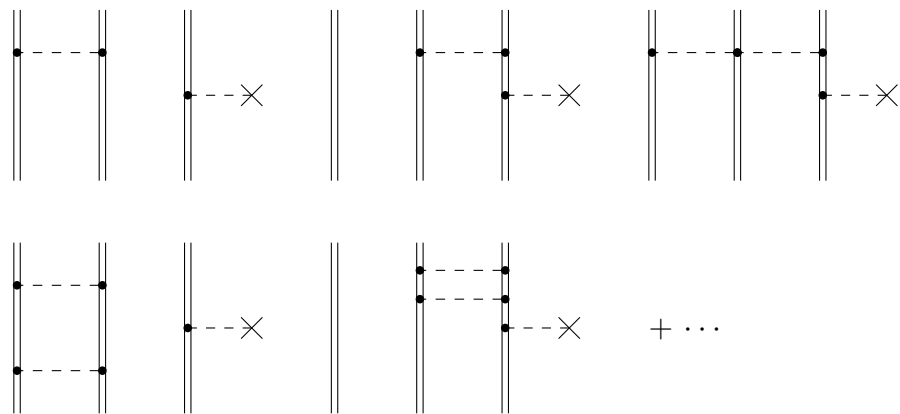
3.4.4 Part Non Additive

Introduire Gaunt dans le processus self-consistant et prendre en compte le continuum négatif en supprimant le projecteur sont deux effets interdépendants. En effet, cumuler deux calculs : l'un avec Gaunt self-consistant et projecteur , l'autre avec Gaunt perturbatif sans projecteur ne permet pas d'obtenir le même résultat qu'avec un seul calcul où l'on a en même temps Gaunt self-consistant et pas de projecteur. La différence entre ces deux manières de procéder représente ce que nous appelons la *Part non additive*.

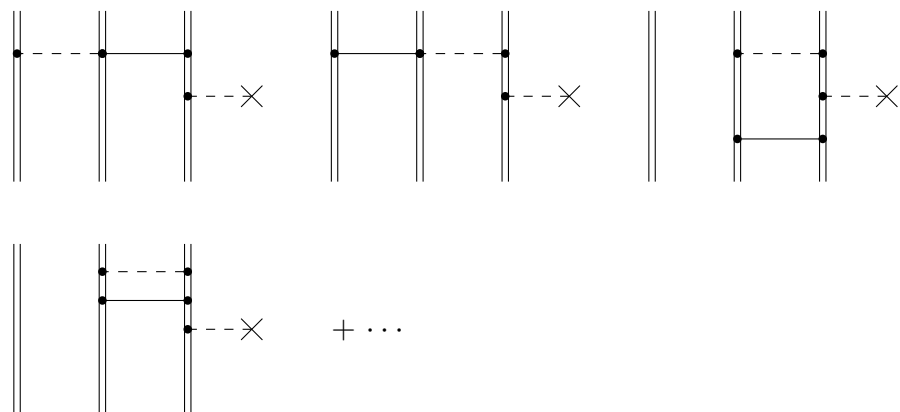
Nous avons reporté sur la Figure 3.10 la variation des trois dernières corrections.

3.4.5 Corrections Radiatives

Pour le calcul des corrections radiatives de la structure hyperfine, il existe deux types distincts de contributions. Ce sont toutes les deux des développements au premier ordre en fonction du champ magnétique externe responsable de la structure hyperfine. Mais les premières résultent du développement du propagateur de la correction et les deuxièmes du développement de la fonction d'onde. On représente respectivement ces corrections pour la polarisation du vide et pour la self-énergie par les diagrammes de la Figure 3.11.



(a)



(b)

Fig. 3.8: Diagrammes de Feynman pour Gaunt self-consistant



Fig. 3.9: Diagrammes avec contribution du continuum négatif

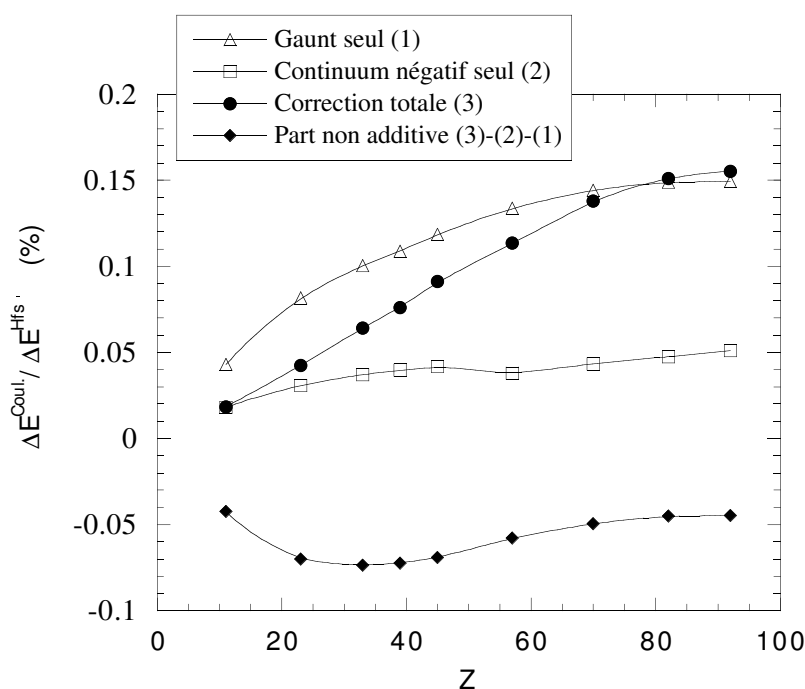


Fig. 3.10: Comparaisons des effets des corrélations magnétiques, du continuum négatif et de la part non additive.

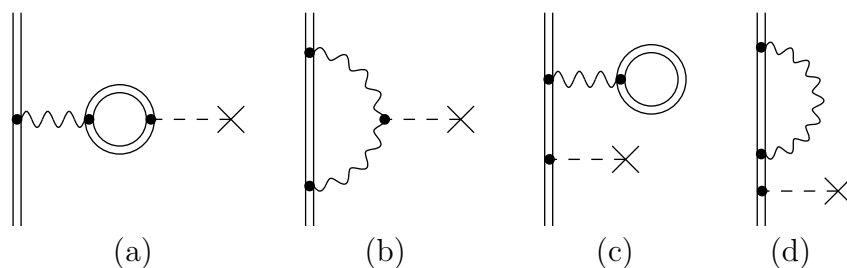


Fig. 3.11: Corrections radiatives à la structure hyperfine. Pour la polarisation du vide et la self-energie développement du propagateur (a) et (b) ou développement de la fonction d'onde (c) et (d).

Polarisation du vide

Nous incluons de manière différente les deux termes de la polarisation du vide. Ainsi dans la Table 3.3, nous avons deux corrections : *Polarisation du vide sur les fonctions d'onde* et *Polarisation du vide sur les boucles*.

La correction sur la fonction d'onde est calculée en introduisant le potentiel

d'Uëling dans le processus self-consistant (Paragraphe 2.7). Contrairement aux autres corrections radiatives, nous calculons alors ce terme à tous les ordres. De plus en introduisant la polarisation du vide dans le processus self-consistant, on modifie la fonction d'onde. Comme pour Gaunt, cela rajoute la contribution de diagrammes mixtes où apparaissent simultanément deux interactions. Au total nous ajoutons des diagrammes avec une ou plusieurs boucles de polarisation du vide seules et/ou en présence de barreaux d'échelle 3.12.

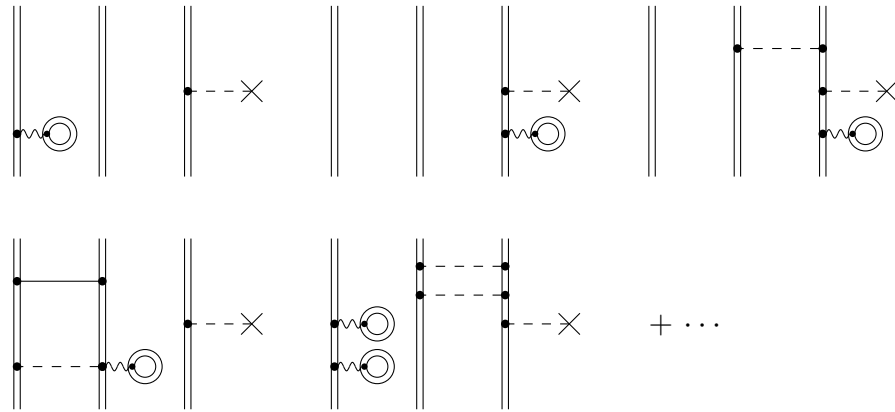


Fig. 3.12: Correction à tous les ordres de la polarisation du vide.

On peut décomposer la contribution de la polarisation du vide self-consistante (VP SC) pour chaque correction : VP SC pour Hfs, VP SC pour Gaunt self-consistant, etc. Les effets de la polarisation du vide self-consistante pour le Bi^{80+} se répartissent de la manière suivante (Table 3.5)

$^{209}\text{Bi}^{80+}$	
VP SC pour Hfs premier ordre	4.131
Contribution des corrélations coulombiennes	+ 0.042
Contribution de l'ensemble des autres corrections	+ 0.007
Total	4.181

Tab. 3.5: Décomposition de la Polarisation du vide self-consistante (VP SC) pour le $^{209}\text{Bi}^{80+}$. On regroupe sous "Autres corrections" : Breit self-consistant, le continuum négatif et la partie non additive. Les énergies sont données en meV.

La correction pour la structure hyperfine étant de loin la plus importante, c'est la seule que nous isolons sous l'intitulé *Polarisation du vide sur les fonctions d'onde*. Les autres contributions dues à la polarisation du vide sont directement intégrées dans les termes représentant les corrections successives.

Le calcul du terme lié au développement du propagateur est issu de l'article de Schneider [63]. Ne disposant que de courbes nous avons estimé la valeur d'une vingtaine de points. Puis nous avons ajusté l'ensemble de ces points par un polynôme en Z^3 de manière à pouvoir interpoler la correction pour tous les Z .

Self-énergie

Contrairement à la polarisation du vide, les deux types de self-énergie sont inclus sous le même intitulé : *Self-énergie*. Nous utilisons les valeurs calculées par Blundell et al. [64] que nous interpolons à tous les Z à l'aide du développement perturbatif en série de $(Z\alpha)$ et $\ln(Z\alpha)^{-2}$ cité par Blundell [72, 73] :

$$\begin{aligned} \Delta E^{SE} &= \frac{\alpha}{\pi} \Delta E^{Hfs} \left\{ \frac{1}{2} + \left(\ln 2 - \frac{13}{4} \right) \pi(Z\alpha) \right. \\ &+ \left[-\frac{2}{3} \ln^2(Z\alpha)^{-2} \left(\frac{37}{72} - \frac{8}{3} \ln 2 \right) \ln(Z\alpha)^{-2} + 17.1 \right] (Z\alpha)^2 \\ &\left. + \left(\frac{5}{2} \ln 2 - \frac{191}{32} \right) \pi(Z\alpha)^3 \ln(Z\alpha)^{-2} + O((Z\alpha)^3) \right\} \end{aligned} \quad (3.15)$$

où ΔE^{Hfs} est l'énergie de la transition hyperfine sans correction de self-énergie.

Avec ce développement, les valeurs calculées à haut Z divergent rapidement des valeurs de Blundell car $(Z\alpha)$ tend alors vers 1 et les effets deviennent de moins en moins perturbatifs. Pour avoir malgré tout un développement correct, nous devons ajouter des termes dans l'équation (3.15). Nous obtenons les coefficients des principaux termes complémentaires en ajustant la différence entre les valeurs de Blundell et les valeurs calculés, soit au total

$$O((Z\alpha)^3) = -(2.95 + 0.10925 \ln^2(Z\alpha)^{-2})(Z\alpha)^3 - 19.798(Z\alpha)^4 + O((Z\alpha)^4) \quad (3.16)$$

Le résultat permet de reproduire avec une erreur maximale inférieure à 0.4% les valeurs de Blundell et al. et nous permet d'estimer la correction de self-énergie pour tous les Z (Figure 3.13).

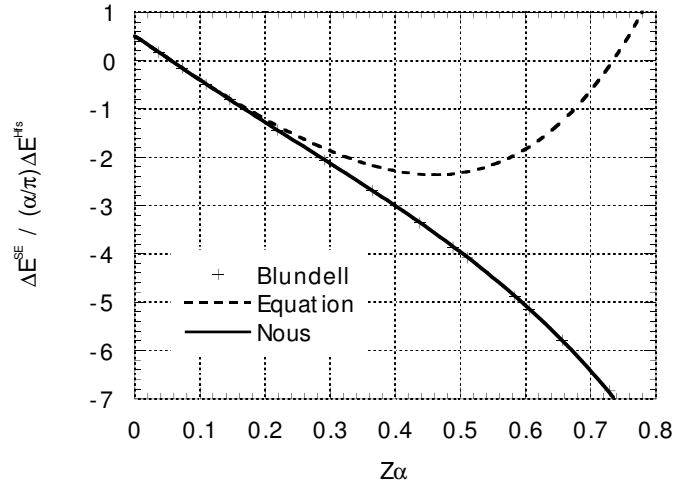


Fig. 3.13: Valeurs calculées par Blundell et par le développement en série de $(Z\alpha)$

3.5 Discussions

En introduisant simultanément ou non les différentes corrections dans le processus self-consistant, nous avons étudié la part relative de chacune dans la transition hyperfine totale.

Nous avons regroupé sur la Figure 3.14 l'évolution de toutes les corrections en fonction de Z . Elles sont exprimées en pourcentage de l'énergie totale de la transition hyperfine. La courbe étant tracée en échelle logarithmique, nous avons indiqué par un signe (-) les corrections négatives. L'ensemble de ces contributions augmente la valeur de la transition à bas Z . Puis l'influence des corrections décroît jusqu'à changer de signe et induire une diminution de la valeur de la transition hyperfine à haut Z . On passe ainsi d'une augmentation d'environ +6% de la transition pour $Z = 11$ à une diminution de -4% de la transition à $Z = 92$. Le changement de signe et par conséquent la compensation mutuelle des différentes corrections se situe vers $Z = 57$. Ce résultat est plus visible sur la courbe de la Figure 3.15 où la contribution totale est tracée seule et en échelle linéaire.

A bas Z , les Corrélations Coulombiennes dominent fortement les autres contributions d'environ deux ordres de grandeur. Progressivement l'écart diminue, cependant même à haut Z , les Corrélations Coulombiennes restent une correction essentielle. Trois composantes augmentent fortement avec Z : l'effet de Bohr-Weisskopf qui devient la correction principale dans les ions lourds et les corrections radiatives (polarisation du vide et self-énergie). Etant donné que nous avons séparé la polarisation du vide sur la fonction d'onde, de la polarisation du vide sur le propagateur, les deux

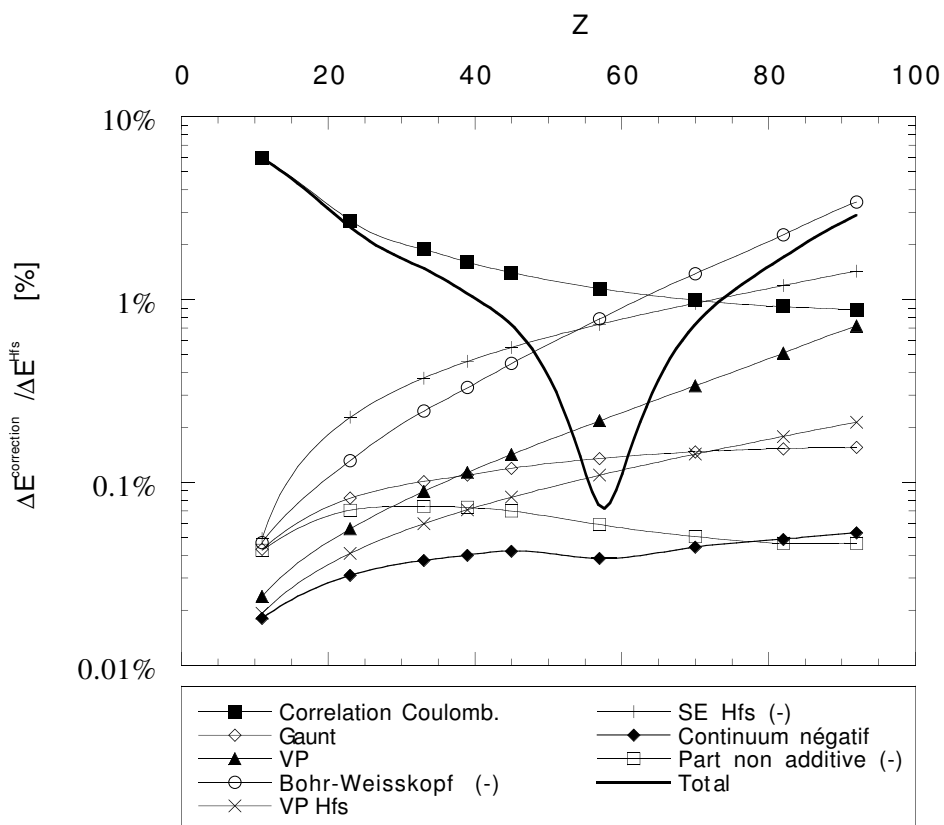


Fig. 3.14: Ensemble des corrections exprimées en pourcentage de la valeur totale de la transition hyperfine.

courbes doivent être ajoutées pour obtenir l'évolution globale de la polarisation du vide. La correction due aux corrélations magnétiques (Gaunt) varie très peu en fonction de Z . Enfin les effets du continuum négatif, soit directs avec la correction du Continuum Négatif, soit indirects avec la part non additive, sont faibles mais non négligeables pour les petits Z . Notons que le "décrochement" entre $Z = 45$ et $Z = 57$ correspond très probablement à la réduction de la taille de la base d'orbitale utilisée. En effet, au-delà de $Z = 45$, nous utilisons une base réduite d'orbitale pour éviter les problèmes de convergence liés au calcul de la fonction d'onde sans projecteur.

Si l'on revient au calcul du Bi^{80+} (Table 3.3), notre calcul est en dehors de la barre d'erreur avec 792.8 meV pour une mesure de 821(26) meV. Lorsque l'on examine les calculs théoriques de Shabaev, nous avons tout d'abord la Ref. [74] où ces résultats sont proches des nôtres tout en restant dans la barre d'erreur expérimentale avec 800(7) meV. Puis après avoir réévalué certains termes [57] Shabaev calcule 797.6(2) meV (toujours dans la barre d'erreur), soit un écart avec notre calcul de 0.6%. Enfin si l'on substitue la correction de Bohr-Weisskopf utilisée par Shabaev dans notre calcul les résultats ne diffèrent que de 0.003%!

La correction de Bohr-Weisskopf est le cœur du problème. Les différents calculs coïncident entre eux hormis concernant cette correction. Shabaev [57] propose une

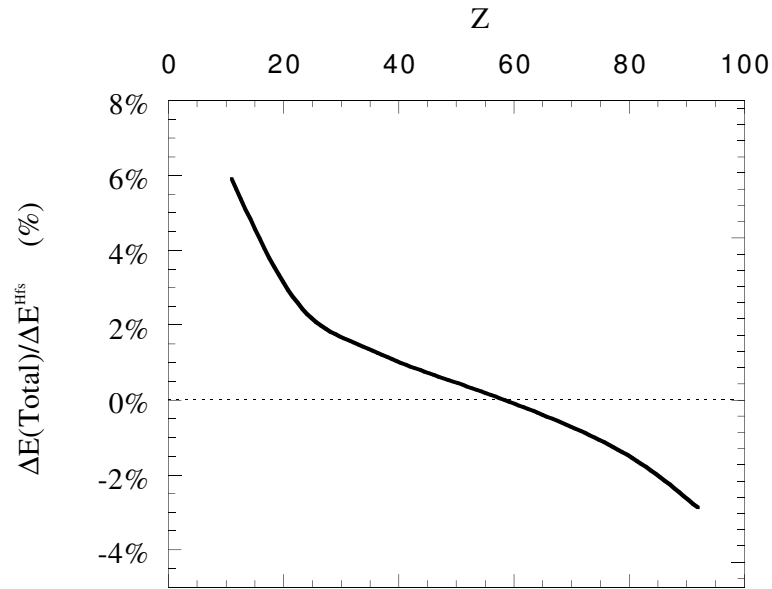


Fig. 3.15: Total des corrections par rapport à l'énergie de la transition hyperfine.

méthode permettant de réduire l'incertitude sur le calcul de Bohr-Weisskopf dans les lithumioïdes. Si l'on possède une bonne mesure de la correction pour le niveau 1s, Bohr-Weisskopf pour le niveau 2s se déduit par une règle simple de proportionnalité. Le problème de cette approche réside dans la méthode qu'emploie Shabaev pour obtenir Bohr-Weisskopf pour le 1s. Il s'agit juste de considérer tout ce que l'on sait calculer, QED comprise, sauf Bohr-Weisskopf que l'on obtient par différence avec la mesure expérimentale. D'où, l'impossibilité d'étudier la partie magnétique de la QED à l'aide de cette méthode.

Figure 3.16, nous donnons les énergie de transitions hyperfines calculées pour les hydrogénoïdes et les lithumioïdes sous forme de graphique. On peut constater la grande régularité entre les deux calculs à l'aide de la courbe du rapport $8\Delta E_{Li}/\Delta E_H$ (Figure 3.17).

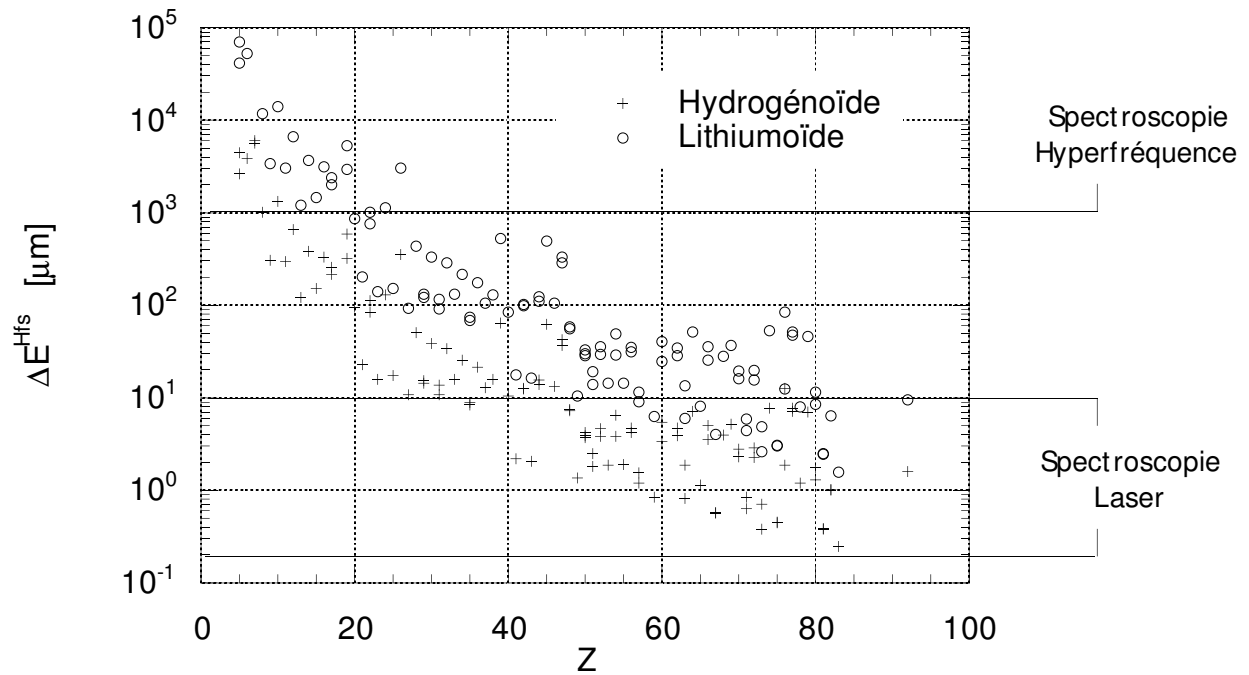


Fig. 3.16: Valeurs des transitions hyperfines du niveau fondamental des ions hydrogéoïdes et lithiumoïdes exprimées en μm en fonction du nombre atomique Z .

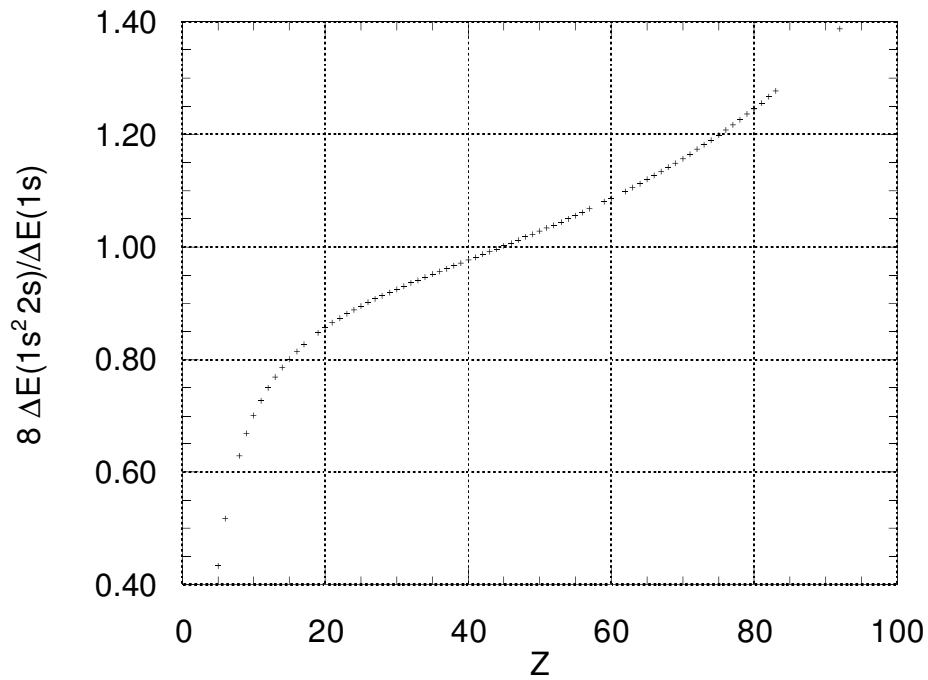


Fig. 3.17: Rapport entre l'énergie de transition hyperfine des ions hydrogéoïdes et lithiumoïdes.

4. CALCUL DANS LES ATOMES ANTI-PROTONIQUES

4.1 Introduction

Grâce à la mise en service de l'anneau de stockage d'anti-protons de basse énergie (LEAR : Low-Energy Antiproton Ring), le CERN est demeuré jusqu'à la fermeture du LEAR fin 1996 le lieu privilégié d'étude des transitions anti-protoniques. En effet, l'intensité du faisceau d'anti-proton du LEAR constituait la seule source de rayons X de brillance suffisante pour permettre une telle étude.

Comme dans tout atome, les expériences de spectroscopie sur les transitions exotiques permettent d'obtenir deux types différents d'informations. C'est d'abord une meilleure connaissance des caractéristiques de la particule elle-même, avec par exemple : la mesure de sa masse ou de son moment magnétique. La spectroscopie des atomes exotiques est aussi une technique d'étude du noyau à travers l'interaction entre ce dernier et la particule. En particulier pour les atomes anti-protoniques formés à partir de l'hydrogène et de ces isotopes, nous avons accès à l'interaction forte à basse énergie entre $\bar{p}p$ ($\bar{p}H$) et $\bar{p}n$ ($\bar{p}D$). Il devient alors possible de déterminer les paramètres liés à l'interaction forte en vue d'une meilleure modélisation.

De nombreux modèles théoriques tentent de décrire et calculer les effets de l'interaction nucléons-antinuéons ($\bar{N}N$) [75, 76, 77, 78, 79]. Mais pour le moment l'accord entre les différents résultats reste mauvais d'où l'importance de pouvoir les comparer à des mesures expérimentales. Les raies $K\alpha$ du protonium ont déjà été observées à plusieurs reprises [80, 81, 82, 83] ce qui a permis de mesurer le décalage et l'élargissement hadroniques du niveau 1s (Table 4.1) et de les comparer aux calculs théoriques (Table 4.2). Il est même possible d'en déduire indirectement l'élargissement du niveau 2p. En revanche pour les raies $L\alpha$, bien qu'elles aient également été observées, la résolution ne permettait pas une détermination directe des caractéristiques de l'interaction forte du niveau 2p.

En effet, l'étude des transitions-X L de l'hydrogène ou du deutérium est plus délicate à mettre en œuvre. Pour augmenter de manière significative la précision des mesures et accéder ainsi aux paramètres de l'interaction forte, il est nécessaire de développer des techniques jamais appliquées aux atomes anti-protoniques. En par-

$\bar{p}H$				
ε_{1s} [eV]	Γ_{1s} [eV]	ε_{2s} [meV]	Γ_{2s} [meV]	Réf.
-750±60	900±180	-	45±10	[80]
-730±50	1130±90	-	-	[81]
-740±150	1600±400	-	-	[82]
-620±110	1130±70	-	32±10	[83]
-726±35	1119±52	-	38.5±7	Moyenne

Tab. 4.1: Décalage et élargissement hadroniques mesurés du niveau 1s du protonium.

$\bar{p}H$		$\varepsilon_{1s}/\Gamma_{1s}$ [keV]											
Hfs	Poids	[75]		[76]		[77]		[78]		[79]		[79]	
1S_0	1/4	-1.60	6.34	-0.86	1.49	-0.59	1.32	-0.60	1.14	-0.54	1.01	-0.50	1.26
3S_1	3/4	-0.53	0.63	-0.71	0.80	-0.87	1.26	-0.93	0.96	-0.75	0.68	-0.75	0.88
Moy.	Pond.	-0.80	2.06	-0.75	0.97	-0.80	1.28	-0.85	1.01	-0.70	0.76	-0.69	0.98

Tab. 4.2: Décalage et élargissement hadronique théoriques du niveau 1s du protonium.

ticulier, il est important d'avoir une résolution suffisante pour résoudre la structure hyperfine. C'est désormais possible grâce à l'utilisation d'un spectromètre de haute résolution à cristal de Bragg utilisant des CCD (Charge-Coupled Device) comme détecteur. Ainsi dans le cadre d'une collaboration internationale, notre équipe a effectué la première mesure directe du décalage et de l'élargissement hadronique du niveau 2p. A chaque étape, soit pour la calibration du spectromètre, soit pour obtenir les résultats finaux, il est nécessaire de réaliser des calculs précis des différentes transitions en tenant compte de la structure hyperfine. Nous avons effectué ces calculs en améliorant l'évaluation des corrections déjà connues et en incluant deux nouveaux termes : le g-2 et la taille finie de la particule. Le g-2 est un terme lié au moment magnétique. Petit dans le cas de l'électron, il est alors calculé dans le décalage de Lamb ce qui n'est pas possible pour l'anti-proton. La taille finie de la particule consiste à considérer le volume de la répartition de charge de l'anti-proton au moment du calcul du potentiel d'interaction électrostatique entre l'anti-proton

et le noyau.

Dans la première partie de ce chapitre nous décrivons brièvement les aspects expérimentaux de cette mesure. Puis nous examinerons les calculs disponibles et les améliorations nécessaires. Les deuxième et troisième sections sont consacrées aux calculs des nouveaux termes. Enfin nous terminons par les résultats du décalage et de l'élargissement hadroniques du niveau $2p$ ainsi obtenus.

4.2 Position du problème

4.2.1 Expérience

Nous n'allons pas décrire en détail l'expérience mais juste en donner le principe général et préciser les caractéristiques importantes du spectromètre. Le lecteur intéressé par une description plus complète de l'expérience pourra se reporter à la thèse de P. El-Khoury [84] ou aux références [85, 86].

Principe Général

Le principe des expériences réalisées est très simple. Le faisceau d'anti-protons du LEAR est décéléré dans un piège anti-cyclotron contenant du gaz d'hydrogène à basse pression. Les anti-protons perdent alors de l'énergie par collision avec les atomes du gaz en même temps qu'ils se dirigent vers le centre de la trappe. Lorsqu'un anti-proton atteint une énergie comparable à celle des électrons atomiques du gaz (hydrogène, helium, etc.), il est capturé par le champ Coulombien de l'atome. La capture s'effectue sur des niveaux très excités, en général entre $n = 40$ pour l'hydrogène jusqu'à $n = 80$ pour les atomes de plus haut Z . L'anti-proton débute alors une cascade dominée par des processus non-radiatifs. En particulier, étant donnée la différence de masse entre anti-proton et électrons ces derniers vont tous être éjectés par effet Auger. Lorsque l'atome est devenu hydrogénoïde anti-protonique, il s'amorce une série de désexcitations radiatives dans le domaine des rayons X. Ce sont ces raies X qui vont être réfléchies par le cristal de Bragg puis détectées par les CCD. Une fois l'énergie des transitions mesurée, on obtient le décalage hadronique par différence entre la transition expérimentale et celle calculée sans tenir compte de l'interaction forte.

Le spectromètre de Bragg

Le spectromètre est constitué d'un cristal de Bragg couplé à des détecteurs CCD.

On utilise un cristal de Bragg pour assurer la dispersion en position de l'énergie. Un rayon-X de la transition arrivant sur le cristal est réfléchi vers les CCD d'un angle de réflexion dépendant de son énergie (loi de Bragg).

Un CCD est un détecteur solide en silicium ayant une structure en pixels. La taille des pixels de $22.5 \mu\text{m} \times 22.5 \mu\text{m}$ permet une excellente résolution en position. Par ailleurs, les détecteurs ont une résolution en énergie de 150 eV dans la région des 2 keV ($L\alpha$). Le couplage de la détection en position et de leur bonne résolution en énergie confère aux CCD une capacité importante de rejet du bruit de fond [84].

Ce type de spectromètre présente plusieurs avantages : les détecteurs ne sont pas directement exposés à la source ce qui contribue à atténuer le bruit de fond ; toutes les transitions sont mesurées simultanément. Au total, l'utilisation conjointe du cristal et des CCD constitue un spectromètre capable de mesurer les raies-X $L\alpha$ de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$ (région des 2 keV) avec une résolution en énergie de $\Delta E/E = 10^{-4}$.

4.2.2 Calcul des Transitions

Avec une telle précision sur les mesures, on est *a priori* susceptible de séparer une partie de la structure hyperfine du niveau 2p. Pour extraire les paramètres de l'interaction forte correspondant, on doit disposer d'une position précise des niveaux hyperfins.

Les derniers calculs du niveau 2p de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$ incluant la structure hyperfine dataient des années 1980 [87, 88, 89]. Plusieurs corrections n'étaient pas prises en compte. Nous avons donc recalculé les transitions dont nous avons besoin.

La structure hyperfine des niveaux anti-protoniques est calculée de manière identique à celle des ions lithumoides décrite au paragraphe 3.2.

Si les atomes exotiques sont de bons outils d'étude du noyau, c'est grâce au recouvrement important entre la fonction d'onde de la particule et celle du noyau. En effet dans les atomes exotiques et en particulier dans les atomes anti-protoniques, la masse de la particule liée est plus importante que celle de l'électron

$$\frac{m_{\bar{p}}}{m_{e^-}} = 1836.152660(83). \quad (4.1)$$

La conséquence principale est de rapprocher du noyau la valeur moyenne du maximum de la fonction d'onde. Par exemple avec le modèle classique de l'atome de Bohr, le rayon d'un atome anti-protonique est plusieurs ordres de grandeur plus petit que dans un atome ordinaire :

$$\frac{r_{\bar{p}}}{r_{e^-}} = \frac{\mu_{e^-}}{\mu_{\bar{p}}} \sim 10^{-3}. \quad (4.2)$$

Dans ces conditions, le rayon moyen de l'orbital d'un atome anti-protonique peut devenir du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de Compton de l'électron. Nous avons vu (Section 2.7) qu'il était alors nécessaire d'inclure le potentiel d'Uëhling dans le processus self-consistant pour obtenir une précision convenable sur le calcul de la polarisation du vide. Tous nos calculs sont effectués avec la polarisation du vide self-consistante.

Nous avons également inclus le terme de recul relativiste lié au traitement non-relativiste du noyau [90]

$$\Delta E_{rec} = -\frac{B_0}{2m_N} \quad (4.3)$$

avec B_0 l'énergie de liaison de la particule et m_N la masse du noyau.

Enfin, nous avons ajouté deux corrections supplémentaires. La première correspond au moment magnétique anormal de l'anti-proton. La seconde prend en compte la taille de l'anti-proton.

L'équation de Dirac utilisée pour déterminer les états liés d'un fermion contient implicitement un moment magnétique $g = 2$ pour la particule. Lorsque le fermion considéré possède un moment magnétique différent, la correction induite par cet écart à 2 du moment magnétique s'appelle correction du $g - 2$. Pour une anti-particule comme l'anti-proton, les règles de symétrie CPT implique $g = -2$ dans l'équation de Dirac. Or l'anti-proton possède un moment magnétique très différent puisque $g_{\bar{p}} = -5.585694772(126)$ [62]. La correction du $g - 2$ correspond alors à l'écart ($g_{\bar{p}} - (-2)$). Le terme diagonal de cette correction a déjà été calculé par Jödicke [88] ; il est du même ordre de grandeur que la structure hyperfine. Cependant Jödicke calcule un terme qui s'avère faux pour les états $s_{1/2}$ et $p_{1/2}$ soit $|\kappa| = 1$. Nous avons calculé le terme complet quel que soit κ : parties électrique et magnétique, termes diagonaux et non-diagonaux.

Contrairement aux électrons, la distribution de charge d'un anti-proton est d'une taille équivalente à celle des noyaux. Il est alors naturel d'imaginer que la taille de l'anti-proton introduit un effet non négligeable. Afin d'évaluer cette correction, nous avons modifié le potentiel électrostatique entre le noyau et la particule en incluant la distribution de charge de l'anti-proton.

4.3 Calcul du g-2

4.3.1 Matrices de Dirac et Spineurs

Rapelons brièvement quelques résultats utiles pour le calcul du g-2.

A l'aide des matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

on définit les termes suivants

$$\begin{aligned} \gamma^0 = \beta &= \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, & \gamma &= \beta \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{\alpha} = \beta \boldsymbol{\gamma} &= \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{\Sigma} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nous avons les relations de commutations

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (4.6)$$

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu] = \gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\sigma^{\mu\nu}. \quad (4.7)$$

avec $g^{\mu\nu}$ le tenseur métrique (Eq. 1.23) et $\sigma^{\mu\nu}$ le tenseur antisymétrique ¹ :

$$\sigma^{\mu\nu} = (\boldsymbol{\alpha}, i\boldsymbol{\Sigma}), \quad (4.8)$$

d'où

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = g^{\mu\nu} + \sigma^{\mu\nu}. \quad (4.9)$$

Les formules de contraction sont les suivantes

$$\begin{aligned} \gamma^\mu \gamma_\mu &= 4 \\ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma_\mu &= -2\gamma^\nu \\ \gamma^\mu \gamma^\lambda \gamma^\nu \gamma_\mu &= 4g^{\lambda\nu} \\ \gamma^\mu \gamma^\lambda \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma_\mu &= -2\gamma^\rho \gamma^\nu \gamma^\lambda \\ \gamma^\mu \gamma^\lambda \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma_\mu &= 2(\gamma^\sigma \gamma^\lambda \gamma^\nu \gamma^\rho + \gamma^\rho \gamma^\nu \gamma^\lambda \gamma^\sigma). \end{aligned} \quad (4.10)$$

On trouve comme traces

$$\begin{aligned} Tr[I] &= 4 \\ Tr[\gamma^\mu] &= 0. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Enfin on écrit fréquemment

$$\not{p} = \gamma p \equiv \gamma^\mu p_\mu = \beta p_0 - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}. \quad (4.12)$$

¹ Attention nous utilisons les mêmes conventions que le Landau et Lifshitz []. En revanche dans d'autres ouvrages comme le Itzykson et Zuber [91] on trouve : $\sigma^{\mu\nu} = (i\boldsymbol{\alpha}, -\boldsymbol{\Sigma})$

4.3.2 Équation de Dirac du second ordre dans un champ extérieur

L'anti-proton est un fermion, le point de départ de tous nos calculs est donc l'équation de Dirac d'une particule libre ponctuelle (1.52), soit

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.13)$$

Lorsque la particule est liée, il nous faut tenir compte du champ électromagnétique créé par le noyau. L'équation (4.13) est alors modifiée en substituant à l'opérateur quadri-impulsion p l'opérateur $p - qA$ où q est la charge de la particule ² et $A^\mu = (\phi/c, \mathbf{A})$ le quadripotential du champ :

$$[\gamma(p - qA) - mc]\psi = 0. \quad (4.14)$$

L'Hamiltonien de cette équation s'obtient simplement en la multipliant à gauche par $\gamma_0 = \beta$, d'où

$$H = [c\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) + q\phi + \beta mc^2]. \quad (4.15)$$

Pour établir la correction phénoménologique due au moment magnétique anormal de l'anti-proton, il est nécessaire de passer par l'équation du second degré. Nous obtenons cette dernière en appliquant l'opérateur $\gamma(p - qA) + mc$ à l'équation du premier ordre (4.14)

$$[\gamma^\mu \gamma^\nu (p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu) - m^2 c^2]\psi = 0. \quad (4.16)$$

Le produit $\gamma^\mu \gamma^\nu$ constitue un tenseur d'ordre deux qui peut être décomposé en partie symétrique et antisymétrique (Eq. 4.9) :

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = g^{\mu\nu} + \sigma^{\mu\nu}. \quad (4.17)$$

On rappelle que tout tenseur peut être décomposé ainsi par :

$$X^{\mu\nu} = \frac{1}{2}(X^{\mu\nu} + X^{\nu\mu}) + \frac{1}{2}(X^{\mu\nu} - X^{\nu\mu}), \quad (4.18)$$

et que seuls les produits des tenseurs de même symétrie sont non nuls. En effet, soit $A^{\mu\nu}$ et $S^{\mu\nu}$ tenseurs antisymétrique et symétrique, nous avons par définition (1.15)

$$A^{\mu\nu} S_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(A^{\mu\nu} S_{\mu\nu} + A^{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}) \quad (4.19)$$

$$= \frac{1}{2}(A^{\mu\nu} S_{\mu\nu} - A^{\beta\alpha} S_{\beta\alpha}) \quad (4.20)$$

$$= \frac{1}{2}(A^{\mu\nu} S_{\mu\nu} - A^{\mu\nu} S_{\mu\nu}) \quad (4.21)$$

$$= 0. \quad (4.22)$$

² q est bien la charge *algébrique*, soit pour un électron ou un anti-proton $q = -e$ avec $e = 1.6019 \times 10^{-19} C$.

Par conséquent en multipliant $(p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu)$ par $\sigma^{\mu\nu}$ dans l'équation (4.16), seule la partie antisymétrique n'est pas nulle. Aussi, pouvons nous substituer dans cette partie de l'équation

$$(p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu) \rightarrow \frac{1}{2}[(p_\mu - qA_\mu), (p_\nu - qA_\nu)] \quad (4.23)$$

avec

$$\frac{1}{2}[(p_\mu - qA_\mu), (p_\nu - qA_\nu)]\psi = \frac{1}{2}q(-A_\mu p_\nu + p_\nu A_\mu - p_\mu A_\nu + A_\nu p_\mu)\psi \quad (4.24)$$

$$= \frac{1}{2}i\hbar q(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu)\psi \quad (4.25)$$

$$= -\frac{1}{2}i\hbar q F_{\mu\nu}\psi \quad (4.26)$$

et $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ le tenseur champ électromagnétique. L'équation du second ordre est alors

$$[(p_\mu - qA_\mu)(p^\mu - qA^\mu) - i\frac{q\hbar}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - m^2c^2]\psi = 0. \quad (4.27)$$

En exprimant le produit $\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ sous forme tridimensionnelle avec

$$\sigma^{\mu\nu} = (\boldsymbol{\alpha}, i\boldsymbol{\Sigma}), \quad F^{\mu\nu} = \left(-\frac{\mathbf{E}}{c}, \mathbf{B}\right), \quad (4.28)$$

nous obtenons

$$\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = 2\left(\frac{\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}}{c} + i\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}\right), \quad (4.29)$$

et l'équation du second ordre s'écrit en unité MKSA

$$\left[\left(i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - q\frac{\phi}{c}\right)^2 - (i\hbar\nabla + q\mathbf{A})^2 - iq\hbar\frac{\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}}{c} + q\hbar\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B} - m^2c^2\right]\psi = 0. \quad (4.30)$$

4.3.3 Équation pour g-2

Il nous faut maintenant modifier l'équation du second ordre (4.30) afin de tenir compte de la correction du moment magnétique de l'anti-proton. Elle apparaît de manière phénoménologique dans l'équation du second ordre sous la forme

$$\left[\left(i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - q\frac{\phi}{c}\right)^2 - (i\hbar\nabla + q\mathbf{A})^2 + (1+a)\left(-iq\hbar\frac{\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}}{c} + q\hbar\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}\right) - m^2c^2\right]\psi = 0, \quad (4.31)$$

et $1+a = g/2$. Ainsi défini, a est la moitié de l'écart à 2 du moment magnétique et lorsque $g = 2$ on retrouve bien $1+a = 1$ soit l'équation de Dirac du second ordre habituelle.

Pour établir le coefficient correct de l'équation du premier ordre, nous allons utiliser l'équation 4.31 correspondant à une particule. Pour une anti-particule, le raisonnement est bien évidemment identique mais avec une valeur de \bar{a} défini par $\bar{a} = \frac{g-(-2)}{2}$ (moitié de l'écart à -2), soit pour l'anti-proton

$$a_{\bar{p}} = -1.792847386 . \quad (4.32)$$

Introduisons un terme supplémentaire dans l'équation de départ (4.14)

$$(\gamma^\mu \pi_\mu - mc + \lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}) \psi = 0, \quad (4.33)$$

avec $\pi_\mu = (p_\mu - qA_\mu)$, λ une constante et déterminons le coefficient λ à l'aide de l'équation du second ordre (4.33) :

$$(\gamma^\mu \pi_\mu - mc + \lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}) (\gamma^\nu \pi_\nu + mc - \lambda \sigma^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}) \psi = 0, \quad (4.34)$$

d'où

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu \gamma^\nu \pi_\mu \pi_\nu - m^2 c^2 - \gamma^\mu \pi_\mu \lambda \sigma^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + \lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \gamma^\nu \pi_\nu \\ + 2mc\lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \lambda^2 \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \sigma^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}) \psi = 0. \end{aligned} \quad (4.35)$$

On peut identifier quatre termes distincts :

$$\gamma^\mu \gamma^\nu \pi_\mu \pi_\nu - m^2 c^2 \rightarrow g = 2, \quad (4.36)$$

$$[\lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \gamma^\nu \pi_\nu] \rightarrow 0, \quad (4.37)$$

$$2mc\lambda \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \rightarrow g - 2, \quad (4.38)$$

$$-\lambda^2 \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \sigma^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \rightarrow \text{Ordre sup.} \quad (4.39)$$

En comparant la partie $g - 2$ ci-dessus avec celle de l'équation (4.31), nous obtenons

$$\begin{aligned} 4imc\lambda &= a\hbar q, \\ \lambda &= -ia \frac{\hbar q}{4mc}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Par conséquent, l'équation de Dirac (4.33) s'écrit

$$\left(\gamma^\mu \pi_\mu - mc - ia \frac{\hbar q}{4mc} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right) \psi = 0 \quad (4.41)$$

ce qui correspond à l'hamiltonien

$$H = c\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) + q\phi + \beta mc^2 + a \frac{\hbar q}{2m} \beta \left(i \frac{\boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}}{c} - \boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B} \right). \quad (4.42)$$

4.3.4 Partie Électrique

Comme nous allons le voir, le calcul de la partie électrique est très simple. Il s'agit du terme

$$\langle n\kappa m | ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \frac{\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}}{c} | n\kappa' m' \rangle, \quad (4.43)$$

de l'équation (4.42) où

$$\mathbf{E} = -\nabla \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_p}{r} \quad (4.44)$$

pour un noyau de charge Zq_p avec Z le numéro atomique et $q_p = e$ la charge d'un proton. Avec la définition (1.66) de la fonction d'onde, nous avons

$$\begin{aligned} & \langle n\kappa m | ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \frac{\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}}{c} | n\kappa' m' \rangle \\ &= ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}c} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{r} (P_{n\kappa} \chi_{\kappa m}^* - iQ_{n\kappa} \chi_{-\kappa m}^*) \\ & \quad \times \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r^3} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa'} \chi_{\kappa' m'} \\ iQ_{n\kappa'} \chi_{-\kappa' m'} \end{pmatrix} r^2 dr d\Omega \\ &= ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}c} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int (P_{n\kappa} \chi_{\kappa m}^* - iQ_{n\kappa} \chi_{-\kappa m}^*) \frac{1}{r^2} \begin{pmatrix} iQ_{n\kappa'} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \chi_{-\kappa' m'} \\ -P_{n\kappa'} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \chi_{\kappa' m'} \end{pmatrix} dr d\Omega. \end{aligned} \quad (4.45)$$

où $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$.

Or nous avons (par exemple voir [92])

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \chi_{\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\chi_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.46)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{r}} \chi_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) = -\chi_{\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.47)$$

et par ailleurs les spineurs $\chi_{\kappa m}$ sont normalisés

$$\int \chi_{\kappa' m'}^* \chi_{\kappa m} d\Omega = \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'}. \quad (4.48)$$

D'où nous obtenons

$$\begin{aligned} & \langle n\kappa m | ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \frac{\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}}{c} | n\kappa' m' \rangle \\ &= ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}c} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{r^2} (-iP_{n\kappa} Q_{n\kappa'} \chi_{\kappa m}^* \chi_{\kappa' m'} - iQ_{n\kappa} P_{n\kappa'} \chi_{-\kappa m}^* \chi_{-\kappa' m'}) dr d\Omega \\ &= a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}c} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{r^2} 2\delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'} P_{n\kappa} Q_{n\kappa} dr \end{aligned} \quad (4.49)$$

et le résultat pour la partie électrique en MKSA est alors

$$\langle n\kappa m | ia \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \frac{\boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}}{c} | n\kappa' m' \rangle = a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{m_{\bar{p}}c} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \int \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'} P_{n\kappa} Q_{n\kappa} \frac{dr}{r^2}. \quad (4.50)$$

Soit encore exprimée en unité atomique où $q_{\bar{p}} = -1$:

$$\langle n\kappa m | -ia \frac{\alpha}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E} | n\kappa' m' \rangle = -a \frac{Z\alpha}{m_{\bar{p}}} \int \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'} P_{n\kappa} Q_{n\kappa} \frac{dr}{r^2}. \quad (4.51)$$

4.3.5 Partie Magnétique

La partie magnétique est bien plus délicate à calculer. Nous avons

$$\langle nI J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | n' I' J' F' M'_F \rangle, \quad (4.52)$$

avec I le spin du noyau³, J (ou J') le moment total des antiprotons, $F = I + J$ (ou F') le moment total du système noyau-antiprotons,

$$\beta \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (4.53)$$

Le potentiel vecteur pour un anti-proton de vecteur position \mathbf{r} est donné par les équations (33.c) et (51) de la Ref. [58]

$$\begin{cases} \mathbf{A} = -i \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_k \sqrt{\frac{k+1}{k}} r^{-k-1} \mathbf{C}^{kk} \cdot \mathbf{M}^k, & (r \geq R) \\ \mathbf{A} = -i \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_k \sqrt{\frac{k+1}{k}} r^k R^{-2k-1} \mathbf{C}^{kk} \cdot \mathbf{M}^k, & (r < R) \end{cases} \quad (4.54)$$

où R est le rayon du noyau, \mathbf{C}^{kk} est un tenseur proportionnel aux harmoniques sphériques (Annexe B.5), \mathbf{M}^k est le tenseur moment multipolaire magnétique et où le produit scalaire de deux tenseurs en représentation sphérique s'écrit (Eq. (7.60) Annexe B.4)

$$\mathbf{C}^{kk} \cdot \mathbf{M}^k = \sum_q (-1)^q C_q^{kk} M_{-q}^k. \quad (4.55)$$

Décomposition en éléments de matrices réduits

Comme pour la structure hyperfine, on peut mettre le terme $\beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}$ sous la forme d'un développement de produit de tenseurs

$$\beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} = \sum_k \mathbf{T}^k \cdot \mathbf{M}^k, \quad (4.56)$$

³ Le noyau reste identique donc avec le même spin I ce qui implique $I' = I$

avec \mathbf{T}^k agissant sur la partie antiprotonique J (J') et \mathbf{M}^k n'agissant que sur la partie nucléaire I . Nous pouvons alors décomposer l'élément de matrice en élément de matrice réduit (7.61)⁴

$$\begin{aligned} \langle I J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \sum_k \mathbf{T}^k \cdot \mathbf{M}^k | I J' F' M'_F \rangle = \\ \sum_k (-1)^{I+J+F'} \delta_{F F'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{array}{ccc} F' & J & I \\ k & I & J' \end{array} \right\} \left(-a \frac{\hbar q}{2m} \right) \langle I || \mathbf{M}^k || I \rangle \langle J || \mathbf{T}^k || J' \rangle \end{aligned} \quad (4.57)$$

puis utiliser le théorème de Wigner-Eckart (7.58) pour calculer la partie antiprotonique

$$\langle J M | T_q^k | J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \langle J || \mathbf{T}^k || J' \rangle \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

L'opérateur total \mathbf{T}^k est la somme des opérateurs sur chaque antiproton

$$\mathbf{T}^k = \sum_{\bar{p}} \mathbf{t}^k, \quad (4.59)$$

d'où nous avons pour les éléments de matrices

$$\langle J M | T_q^k | J' M' \rangle = \sum_{\bar{p}} \langle j m | t_q^k | j' m' \rangle. \quad (4.60)$$

Avec le théorème de Wigner-Eckart (4.58), nous obtenons la relation entre les éléments de matrices réduits

$$\begin{aligned} (-1)^{J-M} \langle J || \mathbf{T}^k || J' \rangle \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \\ = \sum_{\bar{p}} (-1)^{j-m} \langle j || \mathbf{t}_q^k || j' \rangle \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

soit

$$\langle J || \mathbf{T}^k || J' \rangle = \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}} \langle j || \mathbf{t}^k || j' \rangle. \quad (4.62)$$

On rappelle que (Ref. [59])

$$\left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F' \\ J' & I & k \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{ccc} F' & J & I \\ k & I & J' \end{array} \right\}. \quad (4.63)$$

⁴ Sauf si nécessaire, nous omettons dans la suite l'indice n représentant l'ensemble des autres nombres quantiques susceptibles de différencier deux états de mêmes I , J , F et M_F .

Soit avec (4.56), (4.57) et (4.62), nous avons la décomposition en éléments de matrices réduits

$$\begin{aligned}
& \langle I J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \Sigma \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle \\
&= \sum_k (-1)^{I+J+F'} \delta_{F F'} \delta_{M_F M'_F} \begin{Bmatrix} I & J & F' \\ J' & I & k \end{Bmatrix} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \right) \langle I || \mathbf{M}^k || I \rangle \\
&\quad \times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}} \langle j || \mathbf{t}^k || j' \rangle. \quad (4.64)
\end{aligned}$$

Expressions des opérateurs \mathbf{t}^k

Pour déterminer l'expressions des \mathbf{t}^k , nous utilisons les équations (4.54)

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{A} = -i \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_k \sqrt{\frac{k+1}{k}} \nabla \times (r^{-k-1} \mathbf{C}^{kk}) \cdot \mathbf{M}^k, & (r \geq R) \\ \nabla \times \mathbf{A} = -i \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_k \sqrt{\frac{k+1}{k}} R^{-2k-1} \nabla \times (r^k \mathbf{C}^{kk}) \cdot \mathbf{M}^k, & (r < R) \end{cases} \quad (4.65)$$

où le rotationnel n'agit que sur les coordonnées anti-protoniques. Par ailleurs, on peut démontrer les égalités suivantes (par exemple Annexe A de la Ref. [58])

$$\begin{cases} \nabla \times (r^{-k-1} \mathbf{C}_q^{kk}) = -i \sqrt{k(2k+3)} r^{-k-2} \mathbf{C}_q^{k k+1}, & (r \geq R) \\ \nabla \times (r^k \mathbf{C}_q^{kk}) = i \sqrt{(k+1)(2k-1)} r^{k-1} \mathbf{C}_q^{k k-1}, & (r < R) \end{cases} \quad (4.66)$$

D'où pour un anti-proton, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\beta \Sigma \cdot \nabla \times \mathbf{A} &= \sum_k \mathbf{t}^k \cdot \mathbf{M}^k \\
&= \begin{cases} -\frac{\mu_0}{4\pi} \sqrt{(k+1)(2k+3)} r^{-k-2} \beta \Sigma \cdot \mathbf{C}^{k k+1} \cdot \mathbf{M}^k, & (r \geq R) \\ \frac{\mu_0}{4\pi} (k+1) \sqrt{\frac{2k-1}{k}} R^{-2k-1} r^{k-1} \beta \Sigma \cdot \mathbf{C}^{k k-1} \cdot \mathbf{M}^k, & (r < R) \end{cases} \quad (4.67)
\end{aligned}$$

Les tenseurs anti-protoniques sont alors donnés par

$$\begin{cases} \mathbf{t}^k = -\frac{\mu_0}{4\pi} \sqrt{(k+1)(2k+3)} r^{-k-2} \beta \Sigma \cdot \mathbf{C}^{k k+1}, & (r \geq R) \\ \mathbf{t}^k = \frac{\mu_0}{4\pi} (k+1) \sqrt{\frac{2k-1}{k}} R^{-2k-1} r^{k-1} \beta \Sigma \cdot \mathbf{C}^{k k-1}, & (r < R) \end{cases} \quad (4.68)$$

Calcul de l'élément de matrice réduit pour $r \geq R$

Nous avons à calculer l'élément de matrice réduit anti-protonique de (4.64) avec l'expression de \mathbf{t}^k pour $r \geq R$ de (4.68). D'après le théorème de Wigner-Eckart (4.58) pour obtenir cet élément de matrice réduit, il nous faut calculer :

$$\begin{aligned} \langle jm|t_q^k|j'm'\rangle = & -\frac{\mu_0}{4\pi}\sqrt{(k+1)(2k+3)}\int\frac{1}{r}(P_{n\kappa}\chi_{\kappa m}^* - iQ_{n\kappa}\chi_{-\kappa m}^*)r^{-k-2} \\ & \times\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}\mathbf{C}_q^{kk+1}\frac{1}{r}\begin{pmatrix}P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'm'} \\ iQ_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'm'}\end{pmatrix}r^2drd\Omega, \end{aligned} \quad (4.69)$$

soit encore

$$\begin{aligned} \langle jm|t_q^k|j'm'\rangle = & -\frac{\mu_0}{4\pi}\sqrt{(k+1)(2k+3)}\int r^{-k-2}(P_{n\kappa}\chi_{\kappa m}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_q^{kk+1}P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'm'} \\ & - Q_{n\kappa}\chi_{-\kappa m}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_q^{kk+1}Q_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'm'})drd\Omega. \end{aligned} \quad (4.70)$$

L'élément de matrice réduit étant indépendant de m , m' et q , nous pouvons choisir arbitrairement les valeurs de ces trois termes. Afin de simplifier le calcul, nous prenons $m = j$, $m' = j'$ et $q = 0$. Par ailleurs, nous ne calculons que le moment dipolaire soit le cas $k = 1$ d'où

$$\begin{aligned} \langle jj|t_0^1|j'j'\rangle = & -\frac{\mu_0}{4\pi}\sqrt{10}\int r^{-3}(P_{n\kappa}\chi_{\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{12}P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'j'} - Q_{n\kappa}\chi_{-\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{12}Q_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'j'})drd\Omega. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Pour intégrer la partie angulaire, introduisons les harmoniques sphériques vectorielles transverses et longitudinale ⁵ [] Cheng

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{kq}^{(1)} = \sqrt{\frac{k+1}{2k+1}}\mathbf{Y}_q^{kk-1} + \sqrt{\frac{k}{2k+1}}\mathbf{Y}_q^{kk+1} \\ \mathbf{Y}_{kq}^{(0)} = \mathbf{Y}_q^{kk} \\ \mathbf{Y}_{kq}^{(-1)} = \sqrt{\frac{k}{2k+1}}\mathbf{Y}_q^{kk-1} - \sqrt{\frac{k+1}{2k+1}}\mathbf{Y}_q^{kk+1} \end{cases} \quad (4.72)$$

où les $\mathbf{Y}_q^{k\lambda}$ sont les harmoniques sphériques vectorielles définies dans l'Annexe B.5 et reliées aux $\mathbf{C}_q^{k\lambda}$ par

$$\mathbf{C}_q^{k\lambda} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}}\mathbf{Y}_q^{k\lambda}. \quad (4.73)$$

⁵ En effet, nous avons pour $\lambda = 0$ ou 1 des composantes transverses car $\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{Y}_{kq}^{(\lambda)}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$ et pour $\lambda = -1$ une composante longitudinale avec $\hat{\mathbf{r}}\times\mathbf{Y}_{kq}^{(-1)}(\hat{\mathbf{r}}) = 0$

Nous obtenons

$$\mathbf{C}_0^{12} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\mathbf{Y}_{10}^{(1)} - \sqrt{2} \mathbf{Y}_{10}^{(-1)} \right) \quad (4.74)$$

ce qui permet d'écrire la partie angulaire de l'équation (4.71) en fonction des $\mathbf{Y}_{kq}^{(\lambda)}$, avec par exemple pour le premier terme

$$\int \chi_{\kappa j}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{C}_0^{12} \chi_{\kappa' j'} d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \frac{1}{\sqrt{3}} \int \chi_{\kappa j}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{Y}_{10}^{(1)} - \sqrt{2} \mathbf{Y}_{10}^{(-1)} \right) \chi_{\kappa' j'} d\Omega. \quad (4.75)$$

A l'aide des définitions de l'Annexe B, on peut vérifier les formules suivantes données par Cheng []

$$\int \chi_{\kappa m}^* Y_{JM} \chi_{\kappa' m'} d\Omega = I_{\kappa m \kappa' m' JM} \quad (4.76)$$

$$\int \chi_{-\kappa m}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Y}_{JM}^{(1)} \chi_{\kappa' m'} d\Omega = \frac{\kappa' - \kappa}{\sqrt{J(J+1)}} I_{\kappa m \kappa' m' JM} \quad (4.77)$$

$$\int \chi_{-\kappa m}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Y}_{JM}^{(0)} \chi_{\kappa' m'} d\Omega = \frac{\kappa' + \kappa}{\sqrt{J(J+1)}} I_{-\kappa m \kappa' m' JM} \quad (4.78)$$

$$\int \chi_{-\kappa m}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Y}_{JM}^{(-1)} \chi_{\kappa' m'} d\Omega = -I_{\kappa m \kappa' m' JM} \quad (4.79)$$

où

$$\begin{aligned} I_{\kappa m \kappa' m' JM} &= I_{-\kappa m -\kappa' m' JM} \\ &= (-1)^{j'+J-j} \sqrt{\frac{(2j'+1)(2J+1)}{4\pi(2j+1)}} C\left(j' J j; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right) C(j' J j, m' M m) \Pi_{l J l'} \end{aligned} \quad (4.80)$$

avec $C(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3)$ des coefficients de Clebsch-Gordan et

$$\Pi_{l J l'} = \begin{cases} 1 & \text{si } l + J + l' \text{ est pair} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.81)$$

Avec ces formules nous obtenons

$$\int \chi_{\kappa j}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{C}_0^{12} \chi_{\kappa' j'} d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{5.3.2}} (\kappa' + \kappa + 2) I_{-\kappa j \kappa' j' 10} \quad (4.82)$$

et nous avons de même pour la partie angulaire du second terme

$$\int \chi_{-\kappa j}^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{C}_0^{12} \chi_{-\kappa' j'} d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{5.3.2}} (-\kappa' - \kappa + 2) I_{\kappa j -\kappa' j' 10}. \quad (4.83)$$

Par conséquent, l'élément de matrice intégré sur la partie angulaire s'écrit

$$\begin{aligned} \langle j j | t_0^1 | j' j' \rangle &= \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} I_{-\kappa j \kappa' j' 10} \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) dr \end{aligned} \quad (4.84)$$

avec

$$I_{-\kappa j \kappa' j' 10} = (-1)^{j'+1-j} \sqrt{\frac{3(2j'+1)}{4\pi(2j+1)}} C\left(j' 1 j; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right) C(j' 1 j; j' 0 j) \Pi_{l+11\nu}. \quad (4.85)$$

Exprimons les coefficients de Clebsch-Gordan en fonction des symboles $3j$ à partir de la relation (7.46)

$$C(j_1 j_2 j_3; m_1 m_2 m_3) = (-1)^{-j_1+j_2-m_3} \sqrt{2j_3+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}, \quad (4.86)$$

nous obtenons alors

$$\begin{aligned} I_{-\kappa j \kappa' j' 10} &= (-1)^{j'+1-j} \sqrt{\frac{3(2j'+1)}{4\pi(2j+1)}} (-1)^{-j'+1-\frac{1}{2}} \sqrt{(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &\quad \times (-1)^{-j'+1-j} \sqrt{(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ j' & 0 & -j \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu}, \end{aligned} \quad (4.87)$$

soit

$$\begin{aligned} \langle j j | t_0^1 | j' j' \rangle &= \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j'-2j+\frac{1}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ j' & 0 & -j \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\ &\quad \times \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) dr. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Enfin, avec le théorème de Wigner-Eckart

$$\langle j || \mathbf{t}^1 || j' \rangle = \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -j & 0 & j' \end{pmatrix}^{(-1)} \langle j j | t_0^1 | j' j' \rangle \quad (4.89)$$

et les règles de permutation des $3j$ (7.47)

$$\begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -j & 0 & j' \end{pmatrix} = (-1)^{j+j'+1} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ j' & 0 & -j \end{pmatrix}, \quad (4.90)$$

nous pouvons en déduire l'élément de matrice réduit pour $r \geq R$

$$\begin{aligned} \langle j || \mathbf{t}^1 || j' \rangle &= -\frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j+\frac{3}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\ &\quad \times \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) dr. \end{aligned} \quad (4.91)$$

Calcul de l'élément de matrice réduit pour $r < R$

De la même manière, nous pouvons calculer l'élément de matrice réduit pour $r < R$. Nous avons avec (4.68)

$$\begin{aligned} \langle jm|t_q^k|j'm'\rangle = & \\ & \frac{\mu_0}{4\pi}(k+1)\sqrt{\frac{(2k-1)}{k}}R^{-2k-1}\int\frac{1}{r}(P_{n\kappa}\chi_{\kappa m}^* - iQ_{n\kappa}\chi_{-\kappa m}^*)r^{k-1} \\ & \times \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \mathbf{C}_q^{kk-1}\frac{1}{r}\begin{pmatrix} P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'm'} \\ iQ_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'm'} \end{pmatrix} r^2 dr d\Omega \end{aligned} \quad (4.92)$$

soit

$$\begin{aligned} \langle jm|t_q^k|j'm'\rangle = & \\ & \frac{\mu_0}{4\pi}(k+1)\sqrt{\frac{(2k-1)}{k}}R^{-2k-1}\int r^{k-1}(P_{n\kappa}\chi_{\kappa m}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_q^{kk-1}P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'm'} \\ & \times -Q_{n\kappa}\chi_{-\kappa m}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_q^{kk-1}Q_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'm'}) dr d\Omega. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Comme précédemment, nous choisissons $m = j$, $m' = j'$ et $q = 0$, pour le calcul avec $k = 1$

$$\begin{aligned} \langle jj|t_0^1|j'j'\rangle = & \\ & \frac{\mu_0}{4\pi}2R^{-3}\int(P_{n\kappa}\chi_{\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{10}P_{n\kappa'}\chi_{\kappa'j'} - Q_{n\kappa}\chi_{-\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{10}Q_{n\kappa'}\chi_{-\kappa'j'}) dr d\Omega. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Avec

$$\mathbf{C}_0^{10} = \sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\mathbf{Y}_{10}^{(1)} + \mathbf{Y}_{10}^{(-1)}\right), \quad (4.95)$$

nous obtenons

$$\int\chi_{\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{10}\chi_{\kappa'j'}d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}(\kappa' + \kappa - 1)I_{-\kappa j\kappa'j'10} \quad (4.96)$$

et

$$\int\chi_{-\kappa j}^*\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{C}_0^{12}\chi_{-\kappa'j'}d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}(-\kappa' - \kappa - 1)I_{\kappa j-\kappa'j'10}, \quad (4.97)$$

ce qui donne pour l'élément de matrice

$$\begin{aligned} \langle jj|t_0^1|j'j'\rangle = & \\ & 2\frac{\mu_0}{4\pi}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}I_{-\kappa j\kappa'j'10}R^{-3}\int(P_{n\kappa}P_{n\kappa'}(\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa}Q_{n\kappa'}(\kappa' + \kappa + 1)) dr. \end{aligned} \quad (4.98)$$

Avec le terme $I_{-\kappa j \kappa' j' 10}$ déjà calculé dans la section précédente (Equation (4.87)), nous avons

$$\begin{aligned} \langle j j | t_0^1 | j' j' \rangle = & \\ & 2 \frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j'-2j+\frac{1}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ j' & 0 & -j \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\ & \times R^{-3} \int (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 1)) dr. \quad (4.99) \end{aligned}$$

Et là aussi en utilisant (4.89) et (4.90), nous obtenons l'élément de matrice réduit pour $r < R$

$$\begin{aligned} \langle j | | \mathbf{t}^1 | | j' \rangle = & 2 \frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j+\frac{3}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\ & \times R^{-3} \int (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 1)) dr. \quad (4.100) \end{aligned}$$

Résultats

Le moment dipolaire magnétique μ_I d'un noyau est défini en unité de magnéton nucléaire μ_N par

$$\mu_I \mu_N = \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix} \langle I | | \mathbf{M}^1 | | I \rangle \quad (4.101)$$

avec $\mu_N = q_p \hbar / 2m_p$.

En regroupant nos résultats, l'équation (4.64) devient

$$\begin{aligned} \langle I J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle & \\ = \sum_k (-1)^{I+J+F'} \delta_{FF'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{matrix} I & J & F' \\ J' & I & k \end{matrix} \right\} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \right) \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} & \\ \times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}} \langle j | | \mathbf{t}^k | | j' \rangle & \quad (4.102) \end{aligned}$$

avec l'expression des éléments de matrice réduits (4.91) et (4.100)

$$\begin{aligned} \langle j | | \mathbf{t}^1 | | j' \rangle = & -\frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j+\frac{3}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\ & \times \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) dr \quad (r \geq R) \quad (4.103) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle j || \mathbf{t}^1 || j' \rangle &= 2 \frac{\mu_0}{4\pi} (-1)^{-j+\frac{3}{2}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\
&\times R^{-3} \int (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 1)) dr \quad (r < R) \quad (4.104)
\end{aligned}$$

Au total, le résultat de la partie magnétique en MKSA est

$$\begin{aligned}
\langle I J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle &= \\
(-1)^{I+J+F'} \delta_{FF'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{matrix} I & J & F' \\ J' & I & 1 \end{matrix} \right\} &\frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \frac{\mu_0}{4\pi} \right) \\
\times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{-m+\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}} &\sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\
\times - \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) &dr \quad (r \geq R)
\end{aligned} \quad (4.105)$$

$$\begin{aligned}
\langle I J F M_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle &= \\
(-1)^{I+J+F'} \delta_{FF'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{matrix} I & J & F' \\ J' & I & 1 \end{matrix} \right\} &\frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \frac{\mu_0}{4\pi} \right) \\
\times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{-m+\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}} &\sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11\nu} \\
\times 2R^{-3} \int (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 1)) &dr \quad (r < R).
\end{aligned} \quad (4.106)$$

En unité atomique nous avons $q_p = -q_{\bar{p}} = 1$, $\mu_N = 1/2m_p$ et $\mu_0/4\pi = \alpha^2$ (voir

Annexe A), d'où

$$\begin{aligned}
& \langle I J F M_F | \frac{a}{2m_{\bar{p}}} \beta \Sigma \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle = \\
& (-1)^{I+J+F'} \delta_{FF'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F' \\ J' & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(a \frac{\alpha^2}{4m_{\bar{p}}^2} \right) \\
& \times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{-m+\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11'} \\
& \times - \int r^{-3} (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 2) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 2)) dr \quad (r \geq R)
\end{aligned} \tag{4.107}$$

$$\begin{aligned}
& \langle I J F M_F | \frac{a}{2m_{\bar{p}}} \beta \Sigma \cdot \mathbf{B} | I J' F' M'_F \rangle = \\
& (-1)^{I+J+F'} \delta_{FF'} \delta_{M_F M'_F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F' \\ J' & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(a \frac{\alpha^2}{4m_{\bar{p}}^2} \right) \\
& \times \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{-m+\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix}} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} \begin{pmatrix} j' & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \Pi_{l+11'} \\
& \times 2R^{-3} \int (P_{n\kappa} P_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa - 1) + Q_{n\kappa} Q_{n\kappa'} (\kappa' + \kappa + 1)) dr \quad (r < R).
\end{aligned} \tag{4.108}$$

Terme diagonal pour un anti-proton

Nous pouvons vérifier notre calcul en comparant le terme diagonal avec celui de Jödicke [88].

Nous avons (Annexe B.2)

$$\begin{pmatrix} j & 1 & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = (-1)^{j+\frac{1}{2}} \frac{-1}{2\sqrt{(2j+1)(j+1)j}}, \tag{4.109}$$

d'où

$$\begin{aligned} & \langle IJFM_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | IJFM_F \rangle = \\ & (-1)^{I+J+F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F \\ J & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}} \mu_0}{2m_{\bar{p}} 4\pi} \right) \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m & 0 & m \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}} \\ & \quad \times \sqrt{\frac{(2j+1)}{(j+1)j}} \int r^{-3} (P_{n\kappa}^2(\kappa+1) + Q_{n\kappa}^2(\kappa-1)) dr \quad (r \geq R) \quad (4.110) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \langle IJFM_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | IJFM_F \rangle = \\ & (-1)^{I+J+F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & J & F \\ J & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}} \mu_0}{2m_{\bar{p}} 4\pi} \right) \sum_{\bar{p}} \frac{(-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m & 0 & m \end{pmatrix}}{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}} \\ & \quad \times -\sqrt{\frac{(2j+1)}{(j+1)j}} R^{-3} \int (P_{n\kappa}^2(2\kappa-1) + Q_{n\kappa}^2(2\kappa+1)) dr \quad (r < R). \quad (4.111) \end{aligned}$$

S'il n'y a qu'un seul anti-proton $J = j$ et $M = m$

$$\begin{aligned} & \langle IjFM_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | IjFM_F \rangle = \\ & (-1)^{I+J+F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & j & F \\ j & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}} \mu_0}{2m_{\bar{p}} 4\pi} \right) \sqrt{\frac{(2j+1)}{(j+1)j}} \\ & \quad \times \int r^{-3} (P_{n\kappa}^2(\kappa+1) + Q_{n\kappa}^2(\kappa-1)) dr \quad (r \geq R) \quad (4.112) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \langle IjFM_F | -a \frac{\hbar q_{\bar{p}}}{2m_{\bar{p}}} \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} | IjFM_F \rangle = \\ & (-1)^{I+J+F} \left\{ \begin{array}{ccc} I & j & F \\ j & I & 1 \end{array} \right\} \frac{\mu_I \mu_N}{\begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \left(-a \frac{\hbar q_{\bar{p}} \mu_0}{2m_{\bar{p}} 4\pi} \right) \sqrt{\frac{(2j+1)}{(j+1)j}} \\ & \quad \times -R^{-3} \int (P_{n\kappa}^2(2\kappa-1) + Q_{n\kappa}^2(2\kappa+1)) dr \quad (r < R). \quad (4.113) \end{aligned}$$

4.4 Taille Finie de la Particule

Jusqu'à présent la correction due à la taille du noyau a été prise en compte, par contre la répartition de charge de la particule du cortège a toujours été considérée comme ponctuelle. Cette approximation n'est pas correcte pour une particule de rayon non-négligeable devant celui du noyau. Or le rayon de la distribution de charge d'un anti-proton est de l'ordre du Fermi ($r_p = r_{\bar{p}} = 0.862 \text{ Fm}$) soit le même ordre de grandeur que le rayon de la distribution de charge nucléaire. C'est particulièrement vrai dans le cas du protonium où le noyau composé d'un seul proton possède le même rayon que l'anti-proton avec lequel il forme un état lié. Le potentiel électrostatique entre le noyau et la particule doit alors être différent du cas électronique.

Nous avons calculé la modification du potentiel électrostatique induit par cette répartition de charge non ponctuelle. Pour obtenir une première évaluation de cette correction, nous nous sommes placés dans l'approximation d'une distribution sphérique des charges.

4.4.1 Potentiel Electrostatique

Le potentiel d'interaction entre le noyau de charge $q_1 = Ze$ centré en O_1 et une particule de charge q_2 en O_2 est donné par

$$V = \int_{M \in \tau_2} V_1(M) \rho_2 d\tau_2 \quad (4.114)$$

où $V_1(M)$ est le potentiel créé en un point M par la distribution de charge du noyau, τ_2 et ρ_2 sont le volume et la densité volumique de charge de la particule avec

$$q_2 = \int_{\tau_2} \rho_2 d\tau_2. \quad (4.115)$$

Lorsque la distribution de charge de la particule est une sphère homogène de rayon R_2 , la densité volumique de charge ρ_2 est une constante et nous avons pour une particule de même charge que l'électron ($q_2 = -e$), en unité atomique

$$\rho = \frac{-1}{\frac{4}{3}\pi R_2^3}. \quad (4.116)$$

Par ailleurs avec des sphères homogènes, on peut calculer simplement par le théorème de Gauss le potentiel créé par le noyau en un point M de la distribution de charge de la particule. $V_1(M)$ prend deux formes différentes suivant que le point M

est également à l'intérieur ou à l'extérieur du noyau. Nous avons en unité atomique

$$\begin{cases} V_{ext}(r_1) = \frac{Z}{r_1} & (r_1 \leq R_1) \\ V_{int}(r_1) = \frac{Z}{2R_1} \left(3 - \frac{r_1^2}{R_1^2} \right) & (r_1 < R_1) \end{cases} \quad (4.117)$$

avec R_1 le rayon du noyau et $r_1 = O_1M$.

4.4.2 Calcul du Potentiel d'Interaction

Trois configurations sont à envisager pour le calcul du potentiel d'interaction en fonction des rayons R_1 du noyau, R_2 de la particule et de la distance $d = O_1O_2$ entre les centres du noyau et de la particule (Fig. 4.1). Le premier et le troisième cas correspondent à l'utilisation d'un potentiel électrostatique unique respectivement V_{int} et V_{ext} . La particule est alors soit complètement à l'intérieur du noyau, soit complètement en dehors. Le deuxième calcul décrit le recouvrement partiel entre le noyau et la particule.

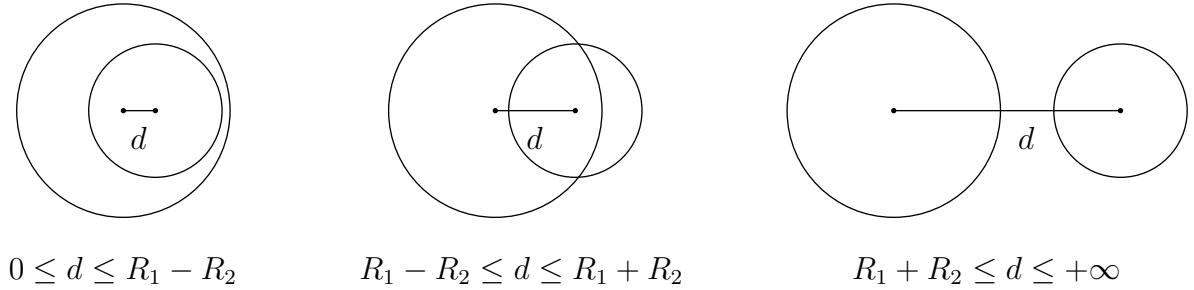


Fig. 4.1: Les trois types de recouvrement en fonction de R_1 , R_2 et d .

Pour $0 \leq d \leq (R_1 - R_2)$: V_i

Il suffit d'intégrer l'équation (4.114) avec le potentiel $V(M) = V_{int}(r_1)$

$$V_i = \iiint_{\tau_2} V_{int}(r_1) \rho dr_1 d\theta_1 d\varphi. \quad (4.118)$$

En utilisant les paramètres définis sur la figure 4.2, on effectue le changement de

variable suivant

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{d^2 + r_2^2 + 2 d r_2 \cos \theta_2} \\ \theta_1 &= \arctan \left[\frac{r_2 \sin \theta_2}{d + r_2 \cos \theta_2} \right] . \\ \varphi &= \varphi \end{aligned} \quad (4.119)$$

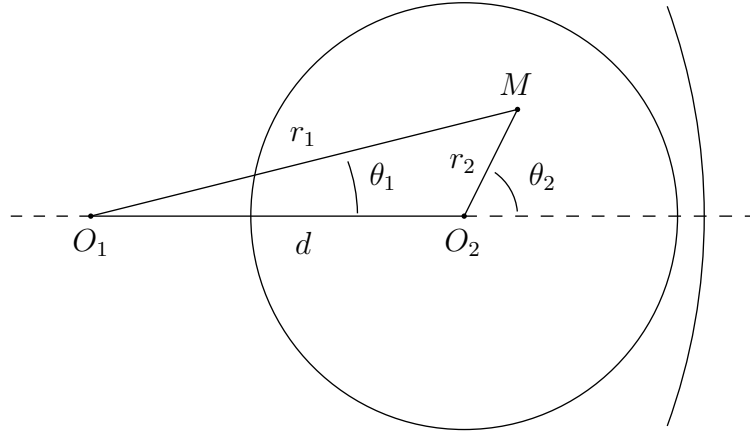


Fig. 4.2: Paramètres et coordonnées utilisés dans le cas d'un recouvrement total ou nul de la particule et du noyau.

L'équation (4.118) devient

$$V_i = \frac{-3}{4\pi R_2^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{R_2} V_{int}(r_1) r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi \quad (4.120)$$

et nous obtenons après intégration

$$V_i = -\frac{Z(-5d^2 + 15R_1^2 - 3R_2^2)}{10R_1^3}. \quad (4.121)$$

Pour $(R_1 + R_2) \leq d \leq \infty$: V_e

Le calcul est identique au précédent mais avec le potentiel $V(M) = V_{ext}(r_1)$ d'où

$$V_e = \frac{-3}{4\pi R_2^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{R_2} V_{ext}(r_1) r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi \quad (4.122)$$

et l'on retrouve le résultat connu

$$V_e = -\frac{Z}{d}. \quad (4.123)$$

Pour $(R_1 - R_2) \leq d \leq (R_1 + R_2) : V_m$

La symétrie du problème n'est plus sphérique mais cylindrique. Nous choisissons de placer l'origine O à l'intersection de la droite portant les centres O_1 et O_2 , et du plan contenant le cercle intersection des deux sphères (Fig. 4.3). Nous effectuons le changement de variable suivant

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{\rho^2 + z^2} \\ \theta &= \arctan \left[\frac{\rho}{z} \right], \\ \varphi &= \varphi \end{aligned} \quad (4.124)$$

ce qui donne pour r_1 ⁶

$$r_1 = \sqrt{\rho^2 + (d_1 + z)^2}. \quad (4.125)$$

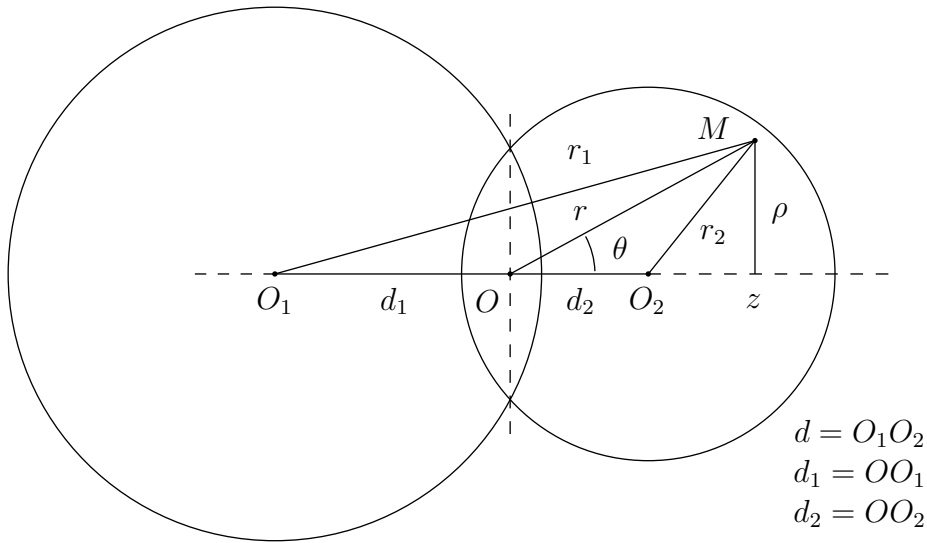


Fig. 4.3: Paramètres et coordonnées utilisés dans le cas d'un recouvrement partiel de la particule et du noyau.

Ainsi, nous pouvons décomposer notre intégrale en deux parties distinctes correspondant à l'utilisation de V_{int} ou de V_{ext} . L'équation (4.114) devient

$$V_m = \frac{-3}{4\pi R_2^3} \left(\iiint_{\tau_1 \cap \tau_2} V_{int}(r_1) d\rho dz d\varphi + \iiint_{\tau_2 - (\tau_1 \cap \tau_2)} V_{ext}(r_1) d\rho dz d\varphi \right). \quad (4.126)$$

⁶ $R_1, R_2, d, d_1, r_1, r_2$ et ρ sont des grandeurs positives, par contre z est une coordonnée qui peut être de signe quelconque.

Et à l'intérieur même de ces deux parties, nous allons décomposer les volumes d'intégration en deux groupes de manière à suivre les différentes coquilles sphériques

$$V_m = \frac{-3}{4\pi R_2^3} (V_m^{int} + V_m^{ext}) \quad (4.127)$$

avec

$$\begin{aligned} V_m^{int} = & \int_0^{2\pi} \int_0^{R_1-d_1} \int_0^{\sqrt{R_1^2-(z+d_1)^2}} V_{int}(r_1) d\rho dz d\varphi \\ & + \int_0^{2\pi} \int_{d_2-R_2}^0 \int_0^{\sqrt{R_2^2-(d_2+z)^2}} V_{int}(r_1) d\rho dz d\varphi \end{aligned} \quad (4.128)$$

et

$$\begin{aligned} V_m^{ext} = & \int_0^{2\pi} \int_0^{R_1-d_1} \int_{\sqrt{R_1^2-(z+d_1)^2}}^{\sqrt{R_2^2-(d_2+z)^2}} V_{ext}(r_1) d\rho dz d\varphi \\ & + \int_0^{2\pi} \int_{R_1-d_1}^{R_2+d_2} \int_0^{\sqrt{R_2^2-(d_2-z)^2}} V_{ext}(r_1) d\rho dz d\varphi. \end{aligned} \quad (4.129)$$

Le résultat total doit être indépendant de l'origine choisie, les dépendances de V_m^{int} et V_m^{ext} en d_1 et d_2 sont donc purement artificielles. Elles peuvent être simplifiées dans V_m à l'aide de

$$\begin{cases} d_1 = \frac{d^2 + R_1^2 - R_2^2}{2d} \\ d_2 = \frac{d^2 + R_2^2 - R_1^2}{2d} \end{cases} \quad (4.130)$$

Au final, nous obtenons

$$\begin{aligned} V_m = & \frac{Z}{160dR_1^3R_2^3} [(d^6 - 15d^4(R_1^2 + R_2^2) + 40d^3(R_1^3 + R_2^3) - 45d^2(R_1^2 - R_2^2)^2 \\ & + 24d(R_1 + R_2)^3(R_1^2 - 3R_1R_2 + R_2^2) - 5(R_1 - R_2)^4(R_1^2 + 4R_1R_2 + R_2^2)] . \end{aligned} \quad (4.131)$$

Potentiel complet

En regroupant (4.121), (4.123) et (4.131), le potentiel électrostatique complet est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \mathbf{0} \leq \mathbf{d} \leq (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \\
 V = -\frac{Z(-5d^2 + 15R_1^2 - 3R_2^2)}{10R_1^3} \\
 (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \leq \mathbf{d} \leq (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) \\
 V = \frac{Z}{160dR_1^3R_2^3} [(d^6 - 15d^4(R_1^2 + R_2^2) + 40d^3(R_1^3 + R_2^3) - 45d^2(R_1^2 - R_2^2)^2 \\
 + 24d(R_1 + R_2)^3(R_1^2 - 3R_1R_2 + R_2^2) - 5(R_1 - R_2)^4(R_1^2 + 4R_1R_2 + R_2^2)] \\
 (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) \leq \mathbf{d} \leq \infty \\
 V = -\frac{Z}{d}
 \end{array} \right. \quad (4.132)$$

Le potentiel électrostatique modifié par la taille finie de la particule introduit une correction de l'ordre de $\Delta E/E = 10^{-4}$ pour le niveau 1s de $\bar{p}\text{H}$. Elle n'est pas négligeable pour cette orbitale. L'effet dû à la taille de la particule est d'autant plus important que l'on est proche du noyau, il décroît en fonction de n et l , et augmente en fonction de Z (le rayon moyen d'une orbitale est en $1/Z$). Par conséquent, dans l'hydrogène ou le deutérium cette correction devient faible dès le niveau 2p.

4.5 Résultats

4.5.1 Énergies de Calibration

Afin d'extraire les paramètres de l'interaction forte, la calibration en énergie et la détermination de la fonction de réponse du spectromètre doivent être réalisées avec une grande précision.

Il existe deux possibilités : soit utiliser des transitions électroniques parfaitement connues, soit prendre des transitions anti-protoniques mais non affectées par l'interaction forte.

Pour calibrer en énergie, les transitions électroniques sont plus précises. Les raies X électroniques de fluorescence $K\alpha$ du Si et de S sont utilisées pour calibrer respec-

tivement les transitions 3d-2p de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$. Les énergies absolues de ces raies de fluorescence sont connues avec une précision inférieure à 10^{-5} .

En revanche, la largeur naturelle des raies $\text{K}\alpha_1$ du Si 524 ± 19 meV et de S 769 ± 03 meV [93] dépasse la résolution du cristal. On ne peut donc pas les utiliser pour extraire la largeur des raies expérimentales. Seules les transitions anti-protoniques avec des largeurs naturelles de quelques meV sont compatibles avec la résolution du spectromètre.

Pour le $\bar{p}\text{H}$ (3d-2p) situé vers 1.7 keV, nous prenons la transition 5g-4f de l'hélium 3 ($\bar{p}^3\text{He}$). La transition la plus proche 5f-4d est à plus de 1 eV, elle est parfaitement résolue et ne perturbe pas la calibration. La transition 3d-2p de $\bar{p}\text{D}$ est calibrée à l'aide du néon antiprotonique $\bar{p}^{20}\text{Ne}$ (13o-12n). Nous avons regroupé l'ensemble de ces calculs dans la Table 4.3. Les deux transitions de calibration sont suffisamment éloignées du noyau pour que le décalage et l'élargissement hadroniques des niveaux considérés soient complètement négligeables.

Transition	Energie [eV]	Ref.
$\bar{p}\text{H}$ (3d-2p)	1736.798	[93]
$\bar{p}^3\text{He}$ (5g-4f)	1686.484	
$\bar{p}^3\text{He}$ (5f-4d)	1687.393	
Si $\text{K}\alpha$	1739.986	
$\bar{p}\text{D}$ (3d-2p)	2316.483	[93]
$\bar{p}^{20}\text{Ne}$ (13o-12n)	2444.400	
S $\text{K}\alpha$	2307.89	

Tab. 4.3: Énergies de calibration anti-protoniques.

4.5.2 Structures des Niveaux 2p et 3d de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$.

Les structures des niveaux 2p et 3d de $\bar{p}\text{H}$ et $\bar{p}\text{D}$ sont donnés Table 4.4. Nous avons séparé la correction du $g - 2$. Les structures calculées sont très différentes des précédents résultats obtenus par Borie [87] et Barmo [89]. Notons également que l'influence de la taille finie de l'anti-proton est de l'ordre de 10^{-5} pour le niveau 2p de l'hydrogène anti-protonique.

On peut suivre sur la Figure 4.4 l'évolution des niveaux avec la structure fine, hyperfine et le $g - 2$. Elles sont toutes les trois du même ordre de grandeur.

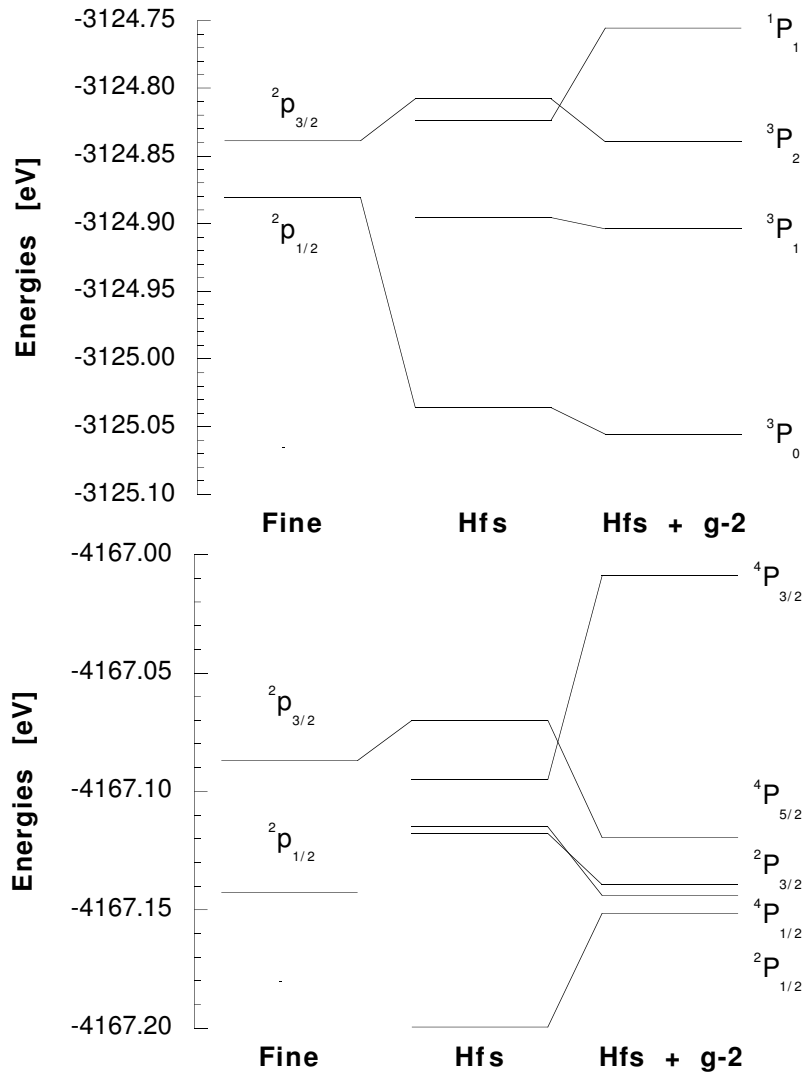


Fig. 4.4: Niveaux d'énergie de $\bar{p}H$ et $\bar{p}D$.

Pour déterminer les paramètres de l'interaction forte du niveau $2p$ du protonium, on soustrait l'énergie des transitions calculées à celles mesurées expérimentalement. Avec cette convention : une énergie négative correspond à un décalage hadronique positif, le potentiel de l'interaction forte est alors répulsif ; inversement une énergie positive correspond à un potentiel attractif.

On ne tient pas compte de la structure du niveau $3d$ qui s'étend pourtant sur environ 20 meV. Les données expérimentales n'ont pas permis de séparer complètement les quatre niveaux hyperfins 3P_2 , 3P_1 , 1P_1 et 3P_0 . Cependant le triplet 3P_0 est suffisamment décalé des trois autres pour former deux groupes distincts : 3P_0 et $({}^3P_2, {}^3P_1, {}^1P_1)$.

En utilisant les poids statistiques des niveaux

$$\frac{2F + 1}{\sum 2F + 1}, \quad (4.133)$$

on détermine le centre de gravité du niveau 3d et du groupe (${}^3P_2, {}^3P_1, {}^1P_1$).

A l'aide de ces calculs, on peut interpréter les spectres expérimentaux. Des résultats préliminaires [] donnent les énergies de transition 3d-2p suivantes

$$\begin{aligned} E_{({}^3P_2, {}^3P_1, {}^1P_1)}^{exp} &= 1736.753 \pm 0.021 \text{ eV} \\ E_{3P_0}^{exp} &= 1737.132 \pm 0.021 \text{ eV} \end{aligned} \quad (4.134)$$

Ceci nous permet d'obtenir la première mesure directe du décalage hadronique du niveau 2p du protonium. Nous obtenons

$$\begin{aligned} \varepsilon_{({}^3P_2, {}^3P_1, {}^1P_1)}^{had} &= -26.5 \pm 14.8 \text{ eV} \\ \varepsilon_{3P_0}^{had} &= 139.5 \pm 15.6 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (4.135)$$

Dans la Table 4.5, nous comparons nos résultats avec les différents décalages calculés théoriquement. L'élargissement hadronique est déduit directement des spectres expérimentaux

$$\begin{aligned} \Gamma_{({}^3P_2, {}^3P_1, {}^1P_1)}^{had} &= 55.8 \pm 8.8 \text{ eV} \\ \Gamma_{3P_0}^{had} &= 119.0 \pm 32.8 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (4.136)$$

L'analyse expérimentale des spectres du deutérium anti-protonique n'étant pas achevée, nous n'avons pas pu calculer les paramètres de l'interaction forte du niveau 2p lui correspondant.

$\bar{p}H$						
Hfs	Poids	E_{Hfs} [eV]	E_{Hfs}^{g-2} [eV]	ΔE_{Hfs} [meV]	ΔE_{Hfs}^{g-2} [meV]	[87]
3P_2	5/12	-3124.808	-3124.840	16	-84	60
3P_1	3/12	-3124.896	-3124.904	-72	-148	-16
1P_1	3/12	-3124.824	-3124.756	0	0	0
3P_0	1/12	-3125.036	-3125.055	-212	-300	-249
Moy. Pond.		-3124.853	-3124.853			
3D_3	7/20	-1388.049	-1388.052	2	-7	7
3D_2	5/20	-1388.058	-1388.060	-7	-15	-1
1D_2	5/20	-1388.051	-1388.046	0	0	0
3D_1	3/20	-1388.066	-1388.064	-15	-18	-16
Moy. Pond.		-1388.054	-1388.054			

$\bar{p}D$						
Hfs	Poids	E_{Hfs} [eV]	E_{Hfs}^{g-2} [eV]	ΔE_{Hfs} [meV]	ΔE_{Hfs}^{g-2} [meV]	[89]
$^4P_{5/2}$	3/9	-4167.070	-4167.119	35.52	-13.88	104.32
$^4P_{3/2}$	2/9	-4167.095	-4167.009	10.46	96.69	-361.80
$^2P_{3/2}$	2/9	-4167.118	-4167.139	-12.11	-33.77	194.30
$^4P_{1/2}$	1/9	-4167.115	-4167.144	-9.41	-38.40	-353.40
$^2P_{1/2}$	1/9	-4167.199	-4167.151	-93.86	-45.81	375.50
Moy. Pond.		-4167.106	-4167.106			
$^4D_{7/2}$	4/15	-1850.618	-1850.624	4.34	-1.33	11.46
$^4D_{5/2}$	3/15	-1850.621	-1850.614	1.46	8.48	-37.49
$^2D_{5/2}$	3/15	-1850.623	-1850.626	-0.41	-3.74	29.06
$^4D_{3/2}$	2/15	-1850.623	-1850.621	-0.78	1.97	-10.79
$^2D_{3/2}$	2/15	-1850.628	-1850.628	-5.33	-5.46	3.17
$^4D_{1/2}$	1/15	-1850.631	-1850.625	-8.31	-1.94	-5.87
Moy. Pond.		-1850.623	-1850.623			

Tab. 4.4: Énergies des niveaux hyperfins avec et sans correction du g-2.

$\bar{p}H$		$\varepsilon_{2p}/\Gamma_{2p}$ [meV]																	
Hfs	Poids	Nous		[94]		[95]		[77]		[75]		[78]		[76]		[79]		[79]	
3P_2	5/12	-27	56	-5	45			5	32	20	49	-15	20	3	28	6	24	3	30
3P_1	3/12			-25	32	-35	15	-37	24	-2	36	-38	26	-32	19	-36	20	-29	22
1P_1	3/12			25	29	28	14	29	26	32	24	-2	26	30	28	26	26	29	26
3P_0	1/12	140	119	25	194	69	118	84	130	27	30	-13	50	72	112	74	114	69	96
Moy. Pond.		-13	61	0	50	4	17	7	37	18	38	-17	26	7	33	6	31	7	33

Tab. 4.5: Décalage et élargissement hadroniques du niveau 2p du protonium.

5. CALCUL DANS LES ATOMES PIONIQUES

5.1 Introduction

La mesure de la masse du pion joue un rôle particulier en physique des particules. En effet, en étudiant la désintégration du pion positif

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ \nu_\mu, \quad (5.1)$$

il est possible d'obtenir des informations sur la masse du neutrino. La précision sur la masse du pion est alors le facteur limitant pour calculer m_ν^2 et par suite une barrière haute de m_ν .

La masse du pion est déterminée à partir des raies de transition dans les atomes pioniques. C'est alors la masse du pion négatif (π^-) qui est mesurée, mais les règles de symétrie CPT impliquent

$$m_{\pi^+} = m_{\pi^-}. \quad (5.2)$$

Jusqu'à présent la mesure la plus précise était celle de Jeckelman effectuée à PSI (Paul Scherrer Institut) avec les raies de transitions pioniques 4f-3d dans ^{24}Mg [96, 97]. Malheureusement cette mesure contient une ambiguïté.

Lors de la cascade pionique les électrons sont éjectés par effet Auger. Mais le magnésium solide utilisé par Jeckelman facilite la recapture électronique. Or la présence d'électrons en plus du pion écrante la charge du noyau. Ceci modifie la transition. Comme seuls les électrons en couche K ont une influence significative sur le décalage des niveaux, il y a trois configurations possibles susceptibles d'influencer la transition 4f-3d : pas d'électron en couche K, un électron en couche K et deux électrons en couche K.

Lors de la mesure en 1986 [96], il avait été considéré qu'un seul électron était présent en couche K. Le résultat obtenu était alors de (solution A)

$$m_{\pi^-} = 139.56782 \pm 0.00037 \text{ MeV}/c^2. \quad (5.3)$$

Mais une nouvelle analyse des spectres expérimentaux en 1994 [98] semble indiquer que deux électrons sont présents en couche K, d'où une nouvelle solution (solution B)

$$m_{\pi^-} = 139.56995 \pm 0.00035 \text{ MeV}/c^2. \quad (5.4)$$

La solution A conduit à une valeur négative de m_ν^2 et n'est donc pas considérée comme physique. En revanche avec la solution B, il a été calculé une limite haute pour m_ν de 170 keV/c². La solution B a alors été retenue comme masse du pion chargé [99].

Les expérimentateurs de notre équipe ont mesuré de manière indépendante la masse du pion avec une précision de l'ordre du ppm. Nous pouvons ainsi lever l'ambiguïté sur la détermination entre les deux solutions et calculer une barrière haute pour la masse du neutrino muonique.

L'expérience et les techniques de calculs de ce chapitre sont similaires à celles utilisées dans les chapitres précédents. Dans les deux premières parties : principe de l'expérience et calcul, nous développerons donc essentiellement les spécificités liées aux atomes pioniques. Nous concluons avec les résultats sur la masse de π^- et de ν_μ .

5.2 Expérience

L'expérience est quasiment identique à celle sur les atomes anti-protoniques (Chapitre 4) si ce n'est qu'elle a lieu sur la source de pion de l'institut Paul Scherrer en Suisse [84]. Le spectromètre utilisé est le même que celui décrit à la section 4.2.1. Rappelons que grâce à l'utilisation conjointe d'un cristal de Bragg et des CCD, nous attendons une résolution inférieure à 1 eV.

Pour mesurer avec précision la masse du pion sans se heurter aux limitations créées par le magnésium solide, les expérimentateurs utilisent la transition 5g-4f de $\pi^{14}\text{N}$. Les avantages sont les suivants :

1. L'azote étant un gaz, à faible pression la recapture y est plus faible.
2. Cette transition est suffisamment éloignée du noyau pour ne pas être influencée par l'interaction forte.
3. Par ailleurs, la transition parallèle 5f-4d est à plus de 2 eV, elle est donc aisément séparable avec la résolution expérimentale de 200 meV.
4. Le décalage induit par l'écrantage d'un électron en couche K est d'environ 500 meV pour la transition 5g-4f de l'azote pionique ce qui est également détecté grâce à la résolution expérimentale. De plus, notons qu'une évaluation basée sur le programme d'Akylas et Vogel [100] indique une probabilité inférieure à 10% d'avoir un électron résiduel en couche K pour un atome exotique dans l'état 5g.

Nous avons pu alors lever l'ambiguïté sur la détermination de la masse du pion.

5.3 Calculs des Transitions

A la différence de \bar{p} , le pion est un boson de spin 0. Par conséquent dans les atomes pioniques, il n'y a pas de structure fine ou hyperfine. L'équation utilisée n'est plus celle de Dirac (1.52) mais celle de Klein-Gordon (1.37).

Dans le cas d'un calcul à plusieurs corps avec par exemple : un π^- en 5g et un e^- en couche K, il n'y a pas de terme d'échange entre la particule exotique et l'électron. Ainsi les CSF (Eq. 2.8) s'écrivent

$$|\nu\Pi JM\rangle = \sum_i d_i \begin{vmatrix} \psi_1^i(r_1) & \cdots & \psi_N^i(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^i(r_N) & \cdots & \psi_N^i(r_N) \end{vmatrix} \Psi_{exotique} \quad (5.5)$$

où les ψ sont les fonctions d'onde mono-électronique calculées avec l'équation de Dirac et $\Psi_{exotique}$ la fonction d'onde de la particule exotique déterminée avec l'équation de Klein-Gordon.

Les calculs reprennent les corrections de polarisation du vide self-consistante (section 2.7) et le recul relativiste (Eq. 4.3).

La simplicité des calculs dans les atomes pioniques fournissent une bonne vérification de l'importance d'introduire la polarisation du vide dans le processus self-consistant. Nous donnons dans la Table 5.1 les calculs des corrections effectuées pour l'analyse des données de Jeckelman et nous les comparons à nos calculs avec et sans polarisation du vide self-consistante.

5.4 Masses du Pion et du Neutrino Muonique

Afin d'atteindre une précision de l'ordre du ppm sur la mesure de la masse du pion, nous souhaitons utiliser comme raie de calibration la transition 5g-4f de l'oxygène muonique ($\mu^{16}\text{O}$). Le calcul de cette transition est présenté Table 5.2 mais jusqu'à présent la statistique obtenue lors des séries d'expériences ne permet pas de mesurer correctement cette raie. Aussi, il a fallu se rabattre sur la transition électronique $K\alpha_1$ du Cu remesurée récemment avec précision [101]. Cependant, cela limite la précision sur la masse du pion du fait de la largeur de raie plus importante pour $K\alpha_1$ du Cu que pour 5g-4f de $\mu^{16}\text{O}$; mais également du fait des raies satellites qui limitent la précision des ajustements.

En [eV]	[98]	Nous		[98]	Nous	
	Solution A	VP SC	VP Pert.	Solution B	VP SC	VP Pert.
V ₁₁	50.070	50.071	49.964	50.072	50.073	49.966
V ₂₁	0.365	0.364	0.363	0.365	0.364	0.363
V ₁₃	-0.039	-0.039	-0.039	-0.039	-0.039	-0.039
Autres corrections [98]	0.091	0.091	0.091	0.091	0.091	0.091
Ecrantage e ⁻ K	-0.501	-0.501	-0.501	-0.941	-0.941	-0.941
Ecrantage e ⁻ L	-0.030	-0.030	-0.030	-0.022	-0.022	-0.022
Total corrections	49.956	49.956	49.848	49.526	49.527	49.418
m_π [MeV/c ²]	139.56782	139.56782	139.56840	139.56995	139.56995	139.57053

Tab. 5.1: Transition 4f-3d dans $\pi^{24}\text{Mg}$ avec et sans Uëhling self-consistant. Solution A : 1 électron en couche K, solution B : 2 électrons en couche K.

Transition	Energie [eV]	Ref.
$\mu^{16}\text{O}$ (5g-4f)	4023.989	
Cu $K\alpha_{11}$	8047.837 ± 0.006	[101]
Cu $K\alpha_{12}$	8045.293 ± 0.052	[101]

Tab. 5.2: Raie de calibration pour la mesure de la masse du pion.

L'énergie de transition est une fonction quasi-linéaire de la masse du pion. Nous avons calculé les énergies de la transition 5g-4f du $\pi^{14}\text{N}$ correspondant aux différentes masses du pion déjà mesurées (Figure 5.1 et Table 5.3). Seules sont prises en compte les mesures effectuées ces dernières années avec une précision sur la masse du pion inférieure à 0.005 MeV/c². L'incertitude sur les énergies est alors directement proportionnelle à l'incertitude sur les masses. En ajustant les différents points par une droite, nous obtenons une fonction quasi linéaire donnant la masse du pion en fonction de l'énergie de transition mesurée.

Au total, avec une raie mesurée de

$$E_{5g-4f} = 4055.3977 \pm 0.016eV \quad (5.6)$$

	m_π [MeV/c ²]	$\pi^{14}\text{N}$ (5g-4f) [eV]
Assamagan 96 [102]	139.57022±0.00014	4055.3840±0.0040
Jeckelman 94 B [98]	139.56995±0.00035	4055.3762±0.0101
Jeckelman 94 A [98]	139.56782±0.00037	4055.3149±0.0107
Daum 91 [103]	139.56996±0.00067	4055.3765±0.0193
Jeckelman 86 [97]	139.56752±0.00037	4055.3063±0.0107
Abela 84 []	139.5704±0.0011	4055.3892±0.0317
Lu 80 [104]	139.5664±0.0009	4055.2741±0.0259
Carter 76 [105]	139.5686±0.0020	4055.3374±0.0575
Marushenko 76 []	139.5660±0.0024	4055.2626±0.0691

Tab. 5.3: Masses du pion déjà mesurées et énergies correspondantes pour la transition 5g-4f du $\pi^{14}\text{N}$.

et en utilisant la masse du noyau donnée par DiFilippo [106] nous obtenons

$$m_{\pi^-} = 139.57070 \pm 0.00056 \text{ MeV}/c^2 \quad (5.7)$$

soit une précision de 4 ppm.

Cette mesure, affranchie de l'ambiguïté liée à l'écrantage électronique corrobore, la solution B de Jeckelman (5.4).

Nous avons reporté sur la figure 5.2 l'ensemble des mesures effectuées ces dernières années (précision inférieure à 0.005 MeV/c²).

Comme Daum [103, 107], on peut déterminer la masse du neutrino muonique à l'aide de la désintégration du pion positif (5.1). En écrivant la conservation des quadrivecteurs impulsion-énergie de la désintégration, nous obtenons la relation

$$m_{\nu_\mu}^2 = m_{\pi^+}^2 + m_{\mu^-}^2 - 2m_{\pi^+} \sqrt{m_{\mu^+}^2 + p_{\mu^+}^2} \quad (5.8)$$

avec m_{ν_μ} , m_{π^+} et m_{μ^-} les masses respectives du neutrino muonique, du pion positif et du muon négatif; p_{μ^-} est l'impulsion du muon après désintégration.

La valeur de l'impulsion du muon est donnée par [108], elle est de

$$p_{\mu^-} = 29.79207 \pm 0.00012 \text{ MeV}/c. \quad (5.9)$$

La masse du muon provient de la référence [99] et vaut

$$m_{\mu^-} = 105.658389 \pm 0.000034 \text{ MeV}/c^2. \quad (5.10)$$

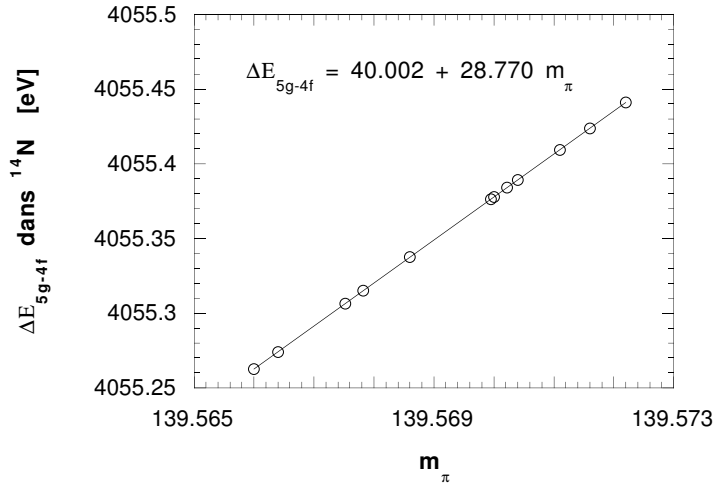


Fig. 5.1: Variation de l'énergie de transition 5g-4f du $\pi^{14}\text{N}$ en fonction de la masse du pion.

Nous déduisons de (5.8) avec (5.7), (5.9) et (5.10), le carré de la masse du neutrino muonique

$$m_{\nu_\mu}^2 = 0.0231 \pm 0.0346 \text{ MeV}^2/c^4 \quad (5.11)$$

et contrairement à de nombreuses autres évaluations [99] elle est positive. Ceci nous permet d'obtenir une barrière haute pour la masse du neutrino muonique en utilisant simplement l'incertitude. Nous obtenons

$$m_{\nu_\mu} < 240 \text{ keV}/c^2. \quad (5.12)$$

On peut vérifier que la précision de la mesure est limitée par la masse du pion. L'incertitude de $m_{\nu_\mu}^2$ s'écrit

$$\sigma_{m_{\nu_\mu}^2}^2 = \left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial m_{\pi^+}} \right)^2 \sigma_{m_{\pi^+}}^2 + \left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial m_{\mu^-}} \right)^2 \sigma_{m_{\mu^-}}^2 + \left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial p_{\mu^-}} \right)^2 \sigma_{p_{\mu^-}}^2 \quad (5.13)$$

avec à partir de l'équation (5.8)

$$\left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial m_{\pi^+}} \right) = 2 \left(m_{\pi^+} - \sqrt{m_{\mu^+}^2 + p_{\mu^+}^2} \right) \approx 59.6 \quad (5.14)$$

$$\left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial m_{\mu^-}} \right) = 2 \left(m_{\mu^-} - \frac{m_{\pi^+} m_{\mu^-}}{\sqrt{m_{\mu^-}^2 + p_{\mu^-}^2}} \right) \approx -57.3 \quad (5.15)$$

$$\left(\frac{\partial m_{\nu_\mu}^2}{\partial p_{\mu^-}} \right) = -\frac{2m_{\pi^+} p_{\mu^-}}{\sqrt{m_{\mu^-}^2 + p_{\mu^-}^2}} \approx -75.7 \quad (5.16)$$

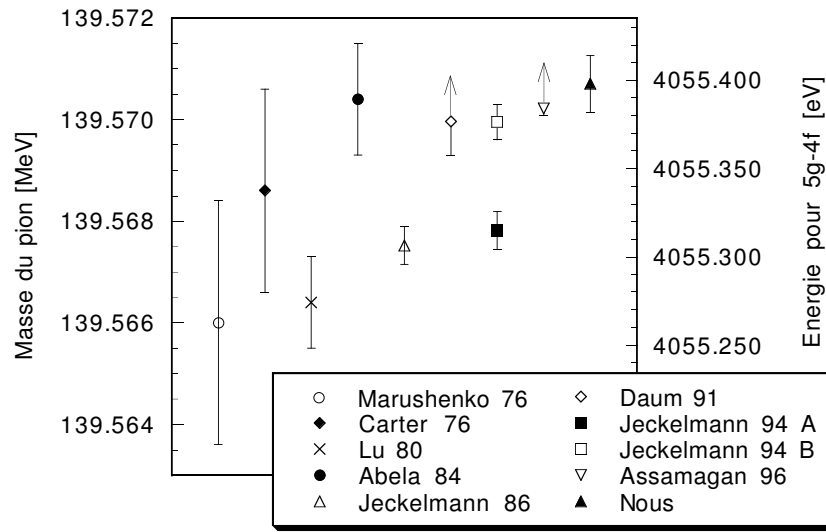


Fig. 5.2: Comparaison des différentes mesures de la masse du pion.

d'où

$$\sigma_{m_{\nu_\mu}^2}^2 \approx (33 \times 10^{-3})^2 + (-2 \times 10^{-3})^2 + (-10 \times 10^{-3})^2 \quad (5.17)$$

$$\approx (1 \times 10^{-3}) + (4 \times 10^{-6}) + (1 \times 10^{-4}). \quad (5.18)$$

6. CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans ce mémoire, nous avons calculé l'énergie de la transitions hyperfines des ions hydrogénoïdes et lithiumoïdes dans l'état fondamental. Nous obtenons ainsi une cartographie par numéro atomique Z des domaines spectroscopiques auxquels appartient chaque transition. En particulier, ces calculs peuvent servir de référence lors de la recherche de résonance dans les futures expériences de mesures des structures hyperfines des ions lithiumoïdes.

Par ailleurs, sur les cas où nous disposions de données expérimentales et où plusieurs moments magnétiques différents étaient en compétition, ces calculs nous ont permis de choisir le moment magnétique correct pour le ^{165}Ho avec $\mu_I = 4.132\mu_N$. En revanche pour le plomb ^{207}Pb , nos calculs et ceux de Shabev étant contradictoires, il n'a pas été possible de lever l'ambiguïté.

Nous avons aussi étudié l'importance relative des différentes contributions qu'il est possible de prendre en compte. Nous disposons ainsi d'une évaluation pour différents Z de chaque correction. Ceci permet d'estimer lors d'un calcul les corrections qu'il est indispensable d'inclure de celles qui sont moins pertinentes. Par contre l'étude des termes de QED en tant que test de l'électrodynamique quantique s'avère impossible à cause de la trop grande incertitude dans l'évaluation du terme de Bohr-Weisskopf. Assurément, l'effort essentiel doit désormais porter sur une meilleure connaissance du modèle utilisé pour décrire la répartition du moment magnétique nucléaire dont dépend cette correction.

Afin d'obtenir des interprétations expérimentales correctes, nous avons dû effectuer des calculs précis des transitions atomiques dans les atomes exotiques. Cela inclut les effets relativistes et la structure hyperfine. De plus, pour améliorer la précision des calculs, il a été nécessaire d'augmenter le nombre de termes pris en compte dans l'évaluation de corrections déjà existantes : par exemple avec l'introduction de la polarisation du vide dans le processus self-consistant. Il a également fallu calculer des corrections nouvelles dont on connaissait à priori l'importance comme le terme de $g-2$. Nous avons aussi évalué des termes qui se sont avérés à posteriori peu pertinents tout au moins dans le cadre de notre étude. C'est le cas de l'effet de la taille finie de la particule qui n'intervient de façon sensible que pour les orbitales $1s$.

L'ensemble de ces calculs nous a permis de fournir la valeur des différentes raies de calibration utilisées par les expériences. Puis avec les résultats préliminaires de ces mêmes expériences, nous avons alors calculé le décalage et l'élargissement ha-

droniques du niveau $2p$ de l'hydrogène. Nous avons également pu lever l'ambiguïté entre les deux résultats proposés par Jeckelman dans la mesure de la masse du pion. Ceci nous a permis de donner une évaluation de la masse au carré du neutrino qui soit positive et d'obtenir simplement, à partir de l'incertitude, une barrière haute acceptable pour la masse du neutrino muonique.

Plusieurs pistes doivent permettre d'améliorer ces résultats. Expérimentalement, il devrait être possible dans un avenir proche de séparer les raies des états 3P_2 , 3P_1 , 1P_1 du niveau $2p$ du protonium. On pourrait alors exploiter pleinement le calcul de la structure hyperfine de ce niveau. Du point de vue théorique, il serait utile d'inclure un potentiel décrivant l'interaction forte dans nos calculs. On pourrait ainsi tenir compte d'un véritable effet d'annihilation nucléon-antinucleon qui est jusqu'à présent traité brutalement par une simple coupure.

ANNEXE

A Unités

A.1 CGS-E, CGS-M, GAUSS (Heaviside-Lorentz) et MKSA

Tous les systèmes conservent les unités de masse M, de longueur L et de temps T. Les unités de l'électromagnétisme sont déterminées en fixant de manière cohérente les constantes de proportionnalité des lois de Coulomb, Lorentz et Ampère :

$$F = k_1 \frac{qq'}{r^2}, \quad (7.1)$$

$$\vec{F} = k_2 q \vec{v} \times \vec{B}, \quad (7.2)$$

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = k_3 I, \quad (7.3)$$

auxquelles il convient d'ajouter :

$$I = \frac{dQ}{dt}. \quad (7.4)$$

Nous obtenons alors :

$$[F] = [k_1] \frac{[Q]^2}{L^2}, \quad (7.5)$$

$$[F] = [k_2][Q] \frac{L}{T} [B], \quad (7.6)$$

$$[B] = [k_3][I]L^{-1}, \quad (7.7)$$

$$[I] = \frac{[Q]}{T} \quad (7.8)$$

où [F] est la dimension de F. Ceci permet d'établir la relation dimensionnelle entre les trois constantes de proportionnalité :

$$\frac{[k_2][k_3]}{[k_1]} = \frac{1}{[V]^2} \quad (7.9)$$

avec [V] = LT^{-1} la dimension d'une vitesse. C'est par la modification des valeurs et des dimensions relatives de ces trois constantes que l'on obtient les différents systèmes d'unité.

Les dimensions des différents grandeurs sont alors données par

$$(7.1) \quad MLT^{-2} = [k_1][Q]^2L^{-2} \Rightarrow [Q] = [k_1]^{-1/2}M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}, \quad (7.10)$$

$$\vec{F} = q\vec{E} \Rightarrow [\vec{E}] = [Q]^{-1}MLT^{-2}, \quad (7.11)$$

$$(7.2) \quad MLT^{-2} = [k_2][Q][\vec{B}]LT^{-1} \Rightarrow [\vec{B}] = [k_2]^{-1}[Q]^{-1}MT^{-1}, \quad (7.12)$$

$$\vec{B} = r\vec{\text{ot}}\vec{A} \Rightarrow [\vec{A}] = [\vec{B}]L = [k_2]^{-1}[Q]^{-1}MLT^{-1}, \quad (7.13)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \Rightarrow [\phi] = [\vec{E}]L = [Q]^{-1}ML^2T^{-2}, \quad (7.14)$$

$$(7.4) \Rightarrow [I] = [Q]T^{-1}. \quad (7.15)$$

Les équations (7.13) et (7.14) implique que

$$\frac{[\phi]}{[\vec{A}]} = \frac{[\vec{E}]}{[\vec{B}]} = [k_2]LT^{-1} \quad (7.16)$$

Enfin mentionnons la dimension de \hbar :

$$[\hbar] = ML^2T^{-1}. \quad (7.17)$$

A partir de l'équation dimensionnelle (7.9), nous posons

$$\frac{k_2k_3}{k_1} = \frac{1}{c^2}. \quad (7.18)$$

Fixons les différentes constantes afin d'obtenir les quatres systèmes d'unité suivants : CGS-E, CGS-M, GAUSS(Heaviside-Lorentz) et MKSA.

CGS – E	CGS – M	GAUSS	MKSA
$k_1 = k_2 = 1$ et $k_3 = \frac{1}{c^2}$	$k_1 = c^2$ et $k_2 = k_3 = 1$	$k_1 = 1$ et $k_2 = k_3 = \frac{1}{c}$ ($k_1 = \frac{1}{4\pi}$, $k_2 = \frac{1}{c}$ et $k_3 = \frac{1}{4\pi c}$)	$k_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$, $k_2 = 1$ et $k_3 = \frac{\mu_0}{4\pi}$
$[Q] = M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}$	$[Q] = M^{1/2}L^{1/2}$	$[Q] = M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}$	$[Q] = Q$
$[\vec{E}] = M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}$	$[\vec{E}] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-2}$	$[\vec{E}] = M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}$	$[\vec{E}] = MLT^{-2}Q^{-1}$
$[\vec{B}] = M^{1/2}L^{-3/2}$	$[\vec{B}] = M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}$	$[\vec{B}] = M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}$	$[\vec{B}] = MT^{-1}Q^{-1}$
$[\vec{A}] = M^{1/2}L^{-1/2}$	$[\vec{A}] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}$	$[\vec{A}] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}$	$[\vec{A}] = MLT^{-1}Q^{-1}$
$[\phi] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}$	$[\phi] = M^{1/2}L^{3/2}T^{-2}$	$[\phi] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}$	$[\phi] = ML^2T^{-2}Q^{-1}$
$[I] = M^{1/2}L^{3/2}T^{-2}$	$[I] = M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}$	$[I] = M^{1/2}L^{3/2}T^{-2}$	$[I] = T^{-1}Q$

Par ailleurs, les valeurs des constantes en système MKSA sont déterminées par la définition de l'Ampère. Par choix nous avons :

$$k_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad k_2 = 1 \text{ et } [Q] = Q. \quad (7.19)$$

la charge devient donc une unité à part entière. Nous voulons également conserver la relation

$$\epsilon_0 \mu_0 c^2 = 1. \quad (7.20)$$

Ceci impose avec (7.18) et (7.19)

$$k_3 = \frac{\mu_0}{4\pi}. \quad (7.21)$$

Enfin l'Ampère est l'intensité d'un courant électrique constant qui, maintenu dans deux conducteurs parallèles rectilignes, de longueur infinie, de section circulaire négligeable, et placés à une distance de 1m l'un de l'autre dans le vide, produirait entre ces deux conducteurs une force de $2 \cdot 10^{-7}$ newton par mètre de longueur.

$$F = \mu_0 \frac{I_1 I_2}{2\pi a} l = \mu_0 \frac{1A \cdot 1A}{2\pi \cdot 1m} \cdot 1m = 2 \cdot 10^{-7} N \quad (7.22)$$

soit

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} MLQ^{-2} \quad (7.23)$$

$$\epsilon_0 = \frac{1}{4\pi \cdot 10^{-7} c^2} M^{-1} L^{-3} T^2 Q^2 \quad (7.24)$$

A.2 Unité Atomique et Naturelle

Unité Atomique

L'unité atomique (ou Hartree) est définie par :

$$q = \hbar = m_e = 1, \quad (7.25)$$

et nous avons $4\pi\epsilon_0 = 1$ d'où $\mu_0/4\pi = \alpha^2$.

Soit pour unité de base :

		Dimension
e=q	charge électrique de l'électron	Q
m_e	masse de l'électron	M
\hbar	constante de Planck divisée par 2π	ML^2T^{-1}
$4\pi\epsilon_0$	4π fois la permittivité du vide	$M^{-1}L^{-3}T^2Q^2$.

Les autres unités sont obtenues en combinant ces quatre quantités. On trouve

ainsi pour unités de longueur, de temps et d'énergie :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e q^2} \rightarrow a_0 = 1 \text{ a.u.}; \quad (7.26)$$

$$\alpha = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 c \hbar} \rightarrow \frac{a_0}{\alpha c} = 1 \text{ a.u.}; \quad (7.27)$$

$$R_\infty = \frac{m_e c \alpha^2}{2h} \rightarrow 2hcR_\infty = 1 \text{ a.u.}. \quad (7.28)$$

Unité Naturelle

L'unité naturelle (ou relativiste) est définie par :

$$c = \hbar = m_e = 1. \quad (7.29)$$

De même que précédemment, nous avons :

		Dimension
c	vitesse de la lumière dans le vide	LT^{-1}
m_e	masse de l'électron	M
\hbar	constante de Planck divisée par 2π	ML^2T^{-1}
$4\pi\epsilon_0$	4π fois la permittivité du vide	$M^{-1}L^{-3}T^2Q^2$

et pour unités de longueur, temps et énergie :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e q^2} \rightarrow \alpha a_0 = 1 \text{ a.u.} \quad (7.30)$$

$$\alpha = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 c \hbar} \rightarrow \frac{\alpha a_0}{c} = 1 \text{ a.u.} \quad (7.31)$$

$$R_\infty = \frac{m_e c \alpha^2}{2h} \rightarrow \frac{2hcR_\infty}{\alpha^2} = m_e c^2 = 1 \text{ a.u.}. \quad (7.32)$$

B Moments Cinétiques

B.1 Opérateurs Moments Cinétiques

On appelle moment cinétique tout opérateur \mathbf{J} de composantes J_x , J_y et J_z vérifiant

$$[J_x, J_y] = \varepsilon_{xyz} i\hbar J_z \quad (7.33)$$

avec ε_{ijk} le tenseur anti-symétrique spatial (1.29).

Il est commode d'introduire les opérateurs suivants

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (7.34)$$

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (7.35)$$

et nous avons les relations de commutation

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad [\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0. \quad (7.36)$$

On peut alors construire une base de l'espace des états $\mathcal{E}(\nu j)$ avec des vecteurs $|\nu jm\rangle$ tels que

$$\mathbf{J}^2|\nu jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|\nu jm\rangle \quad (7.37)$$

$$J_z|\nu jm\rangle = m\hbar|\nu jm\rangle \quad (7.38)$$

$$J_{\pm}|\nu jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|\nu j m \pm 1\rangle \quad (7.39)$$

où ν désigne l'ensemble des nombres quantiques nécessaires pour former un système complet, $j \geq 0$ est entier ou demi-entier et $m = -j, -j+1, \dots, j$.

L'espace $\mathcal{E}(\nu j)$ est de dimension $(2j+1)$ et est globalement invariant sous l'action de toutes fonctions de \mathbf{J} .

B.2 Coefficients de Clebsch-Gordan et Symboles 3j

Soient deux moments cinétiques \mathbf{J}_1 d'un espace $\mathcal{E}_1(\nu_1 j_1)$ et \mathbf{J}_2 d'un espace $\mathcal{E}_2(\nu_2 j_2)$, on peut former le moment cinétique total par

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2. \quad (7.40)$$

\mathbf{J} appartient à l'espace $\mathcal{E}(\nu j)$ de dimension $(2j_1+1)(2j_2+1)$ défini par

$$\mathcal{E}(\nu j) = \mathcal{E}_1(\nu_1 j_1) \otimes \mathcal{E}_2(\nu_2 j_2) \quad (7.41)$$

où \otimes est le produit tensoriel.

De même, les vecteurs d'une base de $\mathcal{E}(\nu j)$ sont définis par

$$|\nu j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |\nu j_1 m_1\rangle \otimes |\nu j_2 m_2\rangle. \quad (7.42)$$

Ils sont vecteurs propres de $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}$ et J_{2z} . On peut en déduire une base constituée des vecteurs propres communs à $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2$ et J_z à partir de la relation

$$|\nu j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\nu j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle. \quad (7.43)$$

Les coefficients de ce développement sont appelés coefficients de Clebsch-Gordan. On peut aussi les écrire

$$C(j_1 j_2 J; m_1 m_2 M) \equiv \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle. \quad (7.44)$$

Ils sont tous réels et ils sont non-nuls ssi

$$\begin{cases} m_1 + m_2 = M \\ |j_1 - j_2| \leq J \leq (j_1 + j_2) \end{cases}. \quad (7.45)$$

On définit le symbole $3j$ par

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + M}}{\sqrt{2J + 1}} C(j_1 j_2 J; m_1 m_2 M). \quad (7.46)$$

Les $3j$ sont les coefficients de couplage vectoriel pour deux moments cinétiques. Ils sont invariants par rapport à une permutation *paire* de colonnes. En revanche une permutation *impaire* entraîne un facteur $(-1)^{j_1 + j_2 + J}$, par exemple :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + J} \begin{pmatrix} j_1 & J & j_2 \\ m_1 & M & m_2 \end{pmatrix}. \quad (7.47)$$

Lorsqu'on change les signes de m_1, m_2 et M , nous retrouvons le même facteur multiplicatif

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + J} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ -m_1 & -m_2 & -M \end{pmatrix}. \quad (7.48)$$

Tous les $3j$ sont calculables, donnons juste la valeur remarquable utilisée pour les calculs de la structure hyperfine (Chapitre 3) et du terme $g - 2$ (Chapitre 4) :

$$\begin{pmatrix} j & 1 & j \\ m & 0 & -m \end{pmatrix} = (-1)^{j+m} \frac{-m}{\sqrt{(2j+1)(j+1)j}}. \quad (7.49)$$

B.3 Harmoniques Sphériques

Soit l'opérateur moment cinétique orbital \mathbf{L} de composantes L_x, L_y et L_z , les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions propres communes de \mathbf{L}^2 et L_z correspondant aux valeurs propres $l(l+1)\hbar^2$ et $m\hbar$:

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (7.50)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (7.51)$$

et nous avons

$$L_{\pm}Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}Y_{lm \pm 1}(\theta, \varphi). \quad (7.52)$$

Par ailleurs, les harmoniques sphériques sont orthonormées

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi)Y_{lm}(\theta, \varphi)d\Omega = \delta_{l'l}\delta_{m'm}, \quad (7.53)$$

on a également

$$Y_{l-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \varphi). \quad (7.54)$$

Enfin, on rappelle le résultat de l'intégration angulaire de trois harmoniques sphériques

$$\int Y_{l_1 m_1}(\theta, \varphi)Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi)Y_{l_3 m_3}(\theta, \varphi)d\Omega = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (7.55)$$

B.4 Opérateurs Tensoriels

Les $(2k+1)$ opérateurs T_q^k avec k entier ≥ 0 et $q = -k, \dots, k$, constituent les composantes d'un opérateur tensoriel irréductible d'ordre k \mathbf{T}^k s'ils vérifient les relations de commutations suivantes avec le moment cinétique total \mathbf{J}

$$[J_{\pm}, T_q^k] = \hbar\sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_{q \pm 1}^k, \quad (7.56)$$

$$[J_z, T_q^k] = \hbar q T_q^k. \quad (7.57)$$

On définit l'élément de matrice réduit à partir du théorème de Wigner-Eckart

$$\langle \nu J M | T_Q^k | \nu' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \langle \nu J || \mathbf{T}^k || \nu' J' \rangle \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}. \quad (7.58)$$

Deux opérateurs tensoriels \mathbf{T}^{k_1} d'ordre k_1 et \mathbf{U}^{k_2} d'ordre k_2 peuvent former un opérateur tensoriel \mathbf{X}^K d'ordre K , de composante

$$X_Q^K = (\mathbf{T}^{k_1} \otimes \mathbf{U}^{k_2})_Q^K = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 q_1 k_2 q_2 | K Q \rangle T_{q_1}^{k_1} U_{q_2}^{k_2} \quad (7.59)$$

avec $|k_1 - k_2| \leq K \leq (k_1 + k_2)$.

Pour le cas particulier $k_1 = k_2 = k$ et $K = 0$, on définit par convention le produit scalaire de deux tenseurs avec ¹

$$(\mathbf{T}^k \cdot \mathbf{U}^k) = \sum_q (-1)^q T_q^k Q_{-q}^k. \quad (7.60)$$

Enfin, l'élément de matrice du produit scalaire est donné par

$$\langle \nu j_1 j_2 JM | \mathbf{T}^k \cdot \mathbf{U}^k | \nu' j'_1 j'_2 J' M' \rangle = (-1)^{j'_1 + j_2 + J'} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \left\{ \begin{matrix} J' & j_2 & j_1 \\ k & j'_1 & j'_2 \end{matrix} \right\} \langle \nu_1 j_1 | | \mathbf{T}^k | | \nu'_1 j'_1 \rangle \langle \nu_2 j_2 | | \mathbf{U}^k | | \nu'_2 j'_2 \rangle. \quad (7.61)$$

avec entre accolades un symbole $6j$ équivalent du $3j$ mais pour le couplage de trois moments cinétiques au lieu de deux (Voir par exemple le Edmonds [59]).

B.5 Harmoniques Sphériques Vectorielles

Nous introduisons les vecteurs sphériques unitaires

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) \end{cases} \quad (7.62)$$

où \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y et \mathbf{e}_z sont les vecteurs unitaires des coordonnées cartésiennes.

Pour $q = 0, \pm 1$, nous avons le complexe conjugué donné par

$$\mathbf{e}_q^* = (-1)^q \mathbf{e}_{-q}, \quad (7.63)$$

et le produit scalaire

$$\mathbf{e}_q^* \cdot \mathbf{e}_{q'} = (-1)^q \mathbf{e}_{-q} \cdot \mathbf{e}_{q'} = \delta_{qq'}. \quad (7.64)$$

Pour un vecteur \mathbf{U} , nous avons de la même manière

$$\mathbf{U}_q^* = (-1)^q \mathbf{U}_{-q}, \quad (7.65)$$

d'où la décomposition

$$\mathbf{U} = \sum_q (-1)^q U_q \mathbf{e}_{-q} = \sum_q (-1)^q U_{-q} \mathbf{e}_q = \sum_q U_q \mathbf{e}_q^* = \sum_q U_q^* \mathbf{e}_q, \quad (7.66)$$

avec chaque composante

$$U_q = \mathbf{U} \cdot \mathbf{e}_q. \quad (7.67)$$

¹ Ceci pour conserver la définition usuelle du produit scalaire de deux vecteurs.

On peut écrire le produit scalaire entre deux vecteurs \mathbf{U} et \mathbf{V} par

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{V} = \sum_q (-1)^q U_q V_{-q} = \sum_q (-1)^q U_{-q} V_q = \sum_q U_q V_q^* = \sum_q U_q^* V_q. \quad (7.68)$$

On introduit les harmoniques sphériques vectorielles à l'aide de la relation (7.43)

$$\mathbf{Y}_M^{Jl}(\theta, \varphi) = \sum_{mq} Y_{lm}(\theta, \varphi) \mathbf{e}_q \langle lm1q | l1JM \rangle \quad (7.69)$$

où $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques.

On définit de la même manière la fonction vectorielle $\mathbf{C}_M^{Jl}(\theta, \varphi)$ où les harmoniques sphériques sont remplacées dans l'expression (7.69) par

$$C_m^l(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (7.70)$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] J. Schwinger, Phys. Rev. **74**, 1439 (1948).
- [2] J. Schwinger, Phys. Rev. **75**, 651 (1949).
- [3] J. Schwinger, Phys. Rev. **76**, 790 (1949).
- [4] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).
- [5] R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 769 (1949).
- [6] R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 749 (1949).
- [7] F. J. Dyson, Phys. Rev. **75**, 486 (1949).
- [8] I. P. Grant, Adv. Phys. **19**, 747 (1970).
- [9] A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics* (Interscience, New York, 1965).
- [10] O. Gorceix and P. Indelicato, Phys. Rev. A **37**, 1087 (1988).
- [11] S. Love, Ann. Phys. (N.Y.) **113**, 153 (1978).
- [12] J. Sucher, J. Phys. B : At. Mol Phys. **21**, L585 (1988).
- [13] Lindgren, Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics **23**, 1085 (1990).
- [14] O. Gorceix, P. Indelicato, and J. P. Desclaux, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **20**, 639 (1987).
- [15] P. Indelicato and E. Lindroth, Phys. Rev. A **46**, 2426 (1992).
- [16] W. E. Lamb and R. C. Retherford, Phys. Rev. **79**, 549 (1950).
- [17] H. A. Bethe, Phys. Rev. **72**, 339 (1947).
- [18] N. M. Kroll and J. W. Lamb, Phys. Rev. **75**, 388 (1949).
- [19] G. E. Brown, J. S. Langer, and G. W. Schaefer, Proc. R. Soc. London, Ser A **251**, 92 (1959).
- [20] G. E. Brown and D. F. Mayers, Proc. R. Soc. London, Ser A **251**, 105 (1959).
- [21] A. M. Desiderio and W. R. Johnson, Phys. Rev. A **3**, 1267 (1971).
- [22] P. J. Mohr, Ann. Phys. (N.Y.) **88**, 26 (1974).
- [23] P. J. Mohr, Ann. Phys. (N.Y.) **88**, 52 (1974).
- [24] P. J. Mohr, Phys. Rev. A **26**, 2338 (1982).
- [25] E. H. Wichmann and N. M. Kroll, Phys. Rev. **101**, 843 (1956).
- [26] E. A. Uehling, Phys. Rev. **48**, 55 (1935).

- [27] L. W. Fullerton and G. A. Rinker, Phys. Rev. A **13**, 1283 (1976).
- [28] G. Soff and P. J. Mohr, Phys. Rev. A **38**, 5066 (1988).
- [29] H. Persson, I. Lindgren, S. Salomonson, and P. Sunnergren, Phys. Rev. A **48**, 2772 (1993).
- [30] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, Phys. Rev. **84**, 1232 (1951).
- [31] C. F. Fischer, *The Hartree-Fock Method for Atoms* (Wiley, New York, 1977).
- [32] C. F. Fischer, Computer Physics Report **3**, 275,325 (1986).
- [33] G. E. Brown and D. E. Ravenhall, Proc. R. Soc. London, Ser A **208**, 552 (1951).
- [34] J. Sucher, Phys. Rev. A **22**, 348 (1980).
- [35] M. H. Mittleman, Phys. Rev. A **24**, 1167 (1981).
- [36] P. Indelicato, Phys. Rev. A **51**, 1132 (1995).
- [37] P. Indelicato, Phys. Rev. Lett. **77**, 3323 (1996).
- [38] W. R. Johnson, S. Blundell, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **37**, 307 (1988).
- [39] J. P. Desclaux, in *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, edited by E. Clementi (STEF, Cagliari, 1993), Vol. A.
- [40] W. R. Johnson and G. Soff, At. Data Nucl. Data Tables **33**, 405 (1985).
- [41] J. D. Zumbro *et al.*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1888 (1984).
- [42] M. W. Johnson *et al.*, Phys. Lett. **161B**, 75 (1985).
- [43] J. D. Zumbro *et al.*, Phys. Lett. **167B**, 383 (1986).
- [44] E. G. Nadjakov, K. P. Marinova, and Y. P. Gangrsky, At. Data Nucl. Data Tables **54**, 133 (1994).
- [45] R. C. Barrett, S. J. Brodsky, G. W. Erickson, and M. H. Goldhaber, Phys. Rev. **166**, 1589 (1968).
- [46] K. N. Huang, Phys. Rev. A **14**, 1311 (1976).
- [47] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986), p. 818.
- [48] M. Abramowitz and I. A. Stegun, in *Handbook of mathematical functions*, edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York, 1965), p. 480.
- [49] E. Fermi, Z. Phys. **60**, 320 (1930).
- [50] T. Kinoshita, *Quantum Electrodynamics* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [51] A. Bohr and V. F. Weisskopf, Phys. Rev. **77**, 94 (1950).
- [52] I. Klaft *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 2425 (1994).
- [53] P. Seelig *et al.*, Phys. Rev. Lett. **to be published**, (1997).
- [54] J. R. C. López-Urrutia, P. Beiersdorfer, D. W. Savin, and K. Widmann, Phys. Rev. Lett. **77**, 826 (1996).
- [55] J. R. C. López-Urrutia *et al.*, Phys. Rev. A **57**, 879 (1998).
- [56] P. Beiersdorfer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **to be published**, (1997).

- [57] V. M. Shabaev *et al.*, Phys. Rev. A **57**, 149 (1998).
- [58] I. Lindgren and A. Rosén, Case Stud. At. Phys. **4**, 93 (1974).
- [59] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1974).
- [60] K. T. Cheng and W. J. Childs, Phys. Rev. A **31**, 2775 (1985).
- [61] A. J. Freeman, M. Weinert, J. P. Desclaux, and J. V. Mallow, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **22**, L1 (1980).
- [62] P. Raghavan, At. Data Nucl. Data Tables **42**, 189 (1989).
- [63] S. M. Schneider, W. Greiner, and G. Soff, Phys. Rev. A **50**, 118 (1994).
- [64] S. A. Blundell, K. T. Cheng, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **55**, 1857 (1997).
- [65] G. Nachtsheim, Ph.D. thesis, Universitat Bonn, 1980.
- [66] L. K. Peker, Nuc. Data Sheets **50**, 137 (1987).
- [67] V. M. Shabaev *et al.*, Phys. Rev. A **56**, 252 (1997).
- [68] H. Persson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1433 (1996).
- [69] V. M. Shabaev, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **27**, 5825 (1994).
- [70] M. Tomaselli, S. M. Schneider, E. Kankeleit, and T. Kühl, Phys. Rev. C **51**, 2989 (1995).
- [71] L. N. Labzowsky, W. R. Johnson, G. Soff, and S. M. Schneider, Phys. Rev. A **51**, 4597 (1995).
- [72] K. Pachucki, Phys. Rev. A **54**, 1994 (1996).
- [73] S. G. Karshenboim, Z. Phys. D **36**, 11 (1996).
- [74] V. M. Shabaev, M. B. Shabaeva, and I. I. Tupitsyn, Phys. Rev. A **52**, 3686 (1995).
- [75] O. D. Dalkarov, K. V. Protasov, and I. S. Shapiro, JETP Lett. **47**, 75 (1988).
- [76] D. Moussallam, Z. Phys. A **325**, 1 (1986).
- [77] A. M. Green and S. Wycech, Nucl. Phys. A **377**, 441 (1982).
- [78] W. Schweiger, J. Haidenbauer, and W. Plessas, Phys. Rev. C **32**, 1261 (1985).
- [79] J. Carbonell, G. Ihle, and J. M. Richard, Z. Phys. A **334**, 329 (1989).
- [80] C. A. Baker *et al.*, Nucl. Phys. A **483**, 631 (1988).
- [81] C. W. E. v. Eijk *et al.*, Nucl. Phys. A **486**, 604 (1988).
- [82] M. Ziegler *et al.*, Phys. Lett. B **206**, 151 (1988).
- [83] R. Bacher *et al.*, Zeitschrift für Physik A - Atomic Nuclei **334**, 93 (1989).
- [84] P. El-Khoury, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie (Paris 6), 1998.
- [85] D. Anagnostopoulos *et al.*, Proposal CERN/PSCC/90-9/P124 (1990).
- [86] D. Anagnostopoulos *et al.*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **56A**, 84 (1997).
- [87] E. Borie, *Physics at LEAR with low-energy cooled antiprotons* (Plenum Press, New York, 1982), Vol. 17, pp. 561–566.
- [88] B. Jödicke, Ph.D. thesis, Universität Karlsruhe, 1985.

-
- [89] S. Barmo, H. Pilkuhn, and H. G. Schlaile, *Zeitschrift für Physics A* **301**, 283 (1981).
- [90] E. Borie, *Phys. Rev. A* **28**, 555 (1983).
- [91] C. Itzykson and J. B. Zuber, *Quantum Field Theory* (Mc Graw Hill, N.Y., 1980), p. 705.
- [92] P. Indelicato and P. J. Mohr, *Phys. Rev. A* **46**, 172 (1992).
- [93] D. Deslattes and T. Mooney, *Priv. comm.* (1990).
- [94] W. B. Kaufmann and H. Pilkuhn, *Phys. Rev. C* **17**, 215 (1978).
- [95] W. B. Kaufmann, *Phys. Rev. C* **19**, 440 (1979).
- [96] B. Jeckelmann *et al.*, *Nucl. Phys. A* **457**, 709 (1986).
- [97] B. Jeckelmann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1444 (1986).
- [98] B. Jeckelmann, P. F. A. Goudsmit, and H. J. Leisi, *Phys. Lett. B* **335**, 326 (1994).
- [99] Particle Data Group, *Phys. Rev. D* **45**, (1994).
- [100] V. R. Akylas and P. Vogel, *Comp. Phys. Communi.* **15**, 291 (1978).
- [101] M. Deutch *et al.*, *Phys. Rev. A* **51**, 283 (1995).
- [102] K. Assamagan *et al.*, *Phys. Rev. D* **53**, 6065 (1996).
- [103] M. Daum *et al.*, *Phys. Lett. B* **265**, 425 (1991).
- [104] D. C. Lu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1066 (1980).
- [105] A. L. Carter *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1380 (1976).
- [106] F. DiFilippo, V. Natarajan, K. R. Boyce, and D. E. Pritchard, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1481 (1994).
- [107] M. Daum *et al.*, *Zeitschrift für Physik C - Particles and Fields* **56**, S114 (1992).
- [108] K. Assamagan *et al.*, *Phys. Lett. B* **335**, 231 (1994).

RéSUMé

Dans ce mémoire, nous présentons des calculs d'énergie de transition dans les ions lithiomoïdes et les atomes exotiques : 1) Les nouvelles sources rendent possible la fabrication d'ions lourds fortement chargés. Nous nous sommes intéressés à l'étude de la structure hyperfine des ions lithiomoïdes. Cela nous permet d'examiner les problèmes relativistes à plusieurs corps et la partie magnétique des corrections d'Electrodynamique Quantique (QED). Dans les ions lourds, ces dernières sont de l'ordre de quelques pour-cents par rapport à l'énergie totale de la transition hyperfine. Nous avons également évalué l'effet de Bohr-Weisskopf lié à la distribution du moment magnétique dans le noyau. Nous avons calculé puis comparé ces différentes contributions en incluant les corrections radiatives (polarisation du vide et self-énergie) ainsi que l'influence du continuum négatif. 2) Un atome exotique est un atome dans lequel un électron du cortège est remplacé par une particule de même charge : μ^- , π^- , \bar{p} ... Des expériences récentes ont permis de gagner trois ordres de grandeur en précision et en résolution. Nous avons voulu améliorer la précision des calculs d'énergies de transitions nécessaires à la calibration et à l'interprétation dans deux cas : la mesure de paramètres de l'interaction forte dans l'hydrogène anti-protonique ($\bar{p}H$) et la détermination de la masse du pion grâce à l'azote pionique (πN). Nos calculs prennent en compte la structure hyperfine et le volume de la distribution de charge de la particule. Nous avons amélioré le calcul de la polarisation du vide qui ne peut plus être traitée au premier ordre de la théorie des perturbations dans le cas des atomes exotiques. Pour les atomes anti-protoniques, nous avons également ajouté la correction du g-2. Elle provient du caractère composite de l'anti-proton qui de ce fait possède un rapport gyromagnétique $g \approx -5.5856$.

Abstract

In this work we present the calculations of transition energies in lithiumlike and in exotics atoms : 1) With the use of new ions beam source, it is now possible to produce highly charged ions. We thus have studied li-like ions hyperfine structure to obtain information on relativistic many-body corrections and the magnetic sector of strong field QED. In heavy ions these are of the order of a few percent of the total transition energy. We also evaluated the Bohr-Weisskopf correction, which depends on the magnetic moment distribution inside the nucleus. We have evaluated the influence of the vacuum polarization and negative continuum states on these correc-

tions. 2) An exotic atom is an atom in which one of the bound electrons is replaced by a negatively charged heavy particle (μ^- , π^- , \bar{p} ...). In recent experiments have improvements in accuracy and resolution by 3 orders of magnitude have been obtained. We have thus improved the precision of calculation of transition energies used for the calibration or the interpretation of experiments on antiprotonic hydrogen ($\bar{p}\text{H}$) and on the determination of the pion mass by the use of pionic nitrogen (πN). Our calculations take into account hyperfine structure, and the charge distribution of the particle. We have improved the calculation of the vacuum polarization, which cannot be calculated in first order only for exotic atoms. For antiprotonic atoms we have also added the g-2 correction that comes from the composite structure of the anti-proton, which thus has $g \approx -5.5856$.