



HAL
open science

Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac

Umberto Morellini

► **To cite this version:**

Umberto Morellini. Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac. Science non linéaire [physics]. Université Paris sciences et lettres, 2024. Français. NNT : 2024UPSLD015 . tel-04775102

HAL Id: tel-04775102

<https://theses.hal.science/tel-04775102v1>

Submitted on 9 Nov 2024

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.



THÈSE DE DOCTORAT

DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à l'Université Paris-Dauphine

Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac

Soutenue par

Umberto MORELLINI

Le 15 octobre 2024

École doctorale n°543

SDOSE

Spécialité

Mathématiques appliquées

Composition du jury :

Philippe GRAVEJAT Professeur, Cergy Paris Université	<i>Président</i>
Christian HAINZL Professeur, Ludwig-Maximilians- Universität München	<i>Rapporteur</i>
Julien SABIN Professeur, Université de Rennes	<i>Rapporteur</i>
Isabelle CATTO Chargée de recherche, Université Paris Dauphine - PSL	<i>Examinatrice</i>
Marcello PORTA Professeur, Scuola Internazionale Superi- ore di Studi Avanzati	<i>Examinateur</i>
Julien TOULOUSE Professeur, Sorbonne Université	<i>Examinateur</i>
Éric SÉRÉ Professeur, Université Paris Dauphine - PSL	<i>Directeur de thèse</i>

Université Paris Dauphine

École doctorale **École Doctorale Sciences de la Décision, des Organisations, de la Société
et de l'Échange**

Unité de recherche **Centre De Recherche en Mathématiques de la Décision, Université
Paris-Dauphine**

Thèse présentée par **Umberto Morellini**

Soutenue le **15 octobre 2024**

En vue de l'obtention du grade de docteur de l'Université Paris Dauphine

Discipline **Mathématiques appliquées**

Spécialité **Sciences**

Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac

Thèse dirigée par **Éric SÉRÉ**

Composition du jury

<i>Rapporteurs</i>	Christian HAINZL	professeur au Ludwig-Maximilians-Universität München	
	Julien SABIN	professeur à l'Université de Rennes	
<i>Examineurs</i>	Philippe GRAVEJAT	professeur au Cergy Paris Université	président du jury
	Isabelle CATTO	chargée de recherche à l'Université Paris Dauphine - PSL	
	Marcello PORTA	professeur au Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati	
	Julien TOULOUSE	professeur au Sorbonne Université	
<i>Directeur de thèse</i>	Éric SÉRÉ	professeur à l'Université Paris Dauphine - PSL	

COLOPHON

Mémoire de thèse intitulé « Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac », écrit par **Umberto MORELLINI**, achevé le 23 octobre 2024, composé au moyen du système de préparation de document **L^AT_EX** et de la classe **yathesis** dédiée aux thèses préparées en France.

Université Paris Dauphine

Doctoral School **École Doctorale Sciences de la Décision, des Organisations, de la Société
et de l'Échange**

University Department **Centre De Recherche en Mathématiques de la Décision, Université
Paris-Dauphine**

Thesis defended by **Umberto Morellini**

Defended on **October 15, 2024**

In order to become Doctor from Université Paris Dauphine

Academic Field **Applied mathematics**

Speciality **Sciences**

Some non-linear models on the Dirac vacuum

Thesis supervised by **Éric SÉRÉ**

Committee members

<i>Referees</i>	Christian HAINZL	Professor at Ludwig-Maximilians-Universität München	
	Julien SABIN	Professor at Université de Rennes	
<i>Examiners</i>	Philippe GRAVEJAT	Professor at Cergy Paris Université	Committee President
	Isabelle CATTO	Junior Researcher at Université Paris Dauphine - PSL	
	Marcello PORTA	Professor at Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati	
	Julien TOULOUSE	Professor at Sorbonne Université	
<i>Supervisor</i>	Éric SÉRÉ	Professor at Université Paris Dauphine - PSL	

Cette thèse a été préparée au

**Centre De Recherche en Mathématiques de la
Décision, Université Paris-Dauphine**

Place du Maréchal De Lattre De Tassigny
75016 Paris
France

☎ +33 1 44 27 42 98

Site <https://ceremade.dauphine.fr>

CEREMADE
UMR CNRS 7534

Alla mia 'Ohana.

Sur terre, ce ne sont pas les occasions
de s'émerveiller qui manquent, mais
les émerveillés.

La nuit de feu, É.-E. Schmitt

Remerciements/Ringraziamenti

'Ohana means family. Family means
nobody gets left behind or forgotten.

Lilo & Stitch

S'agit-il du syndrome de la page blanche? Solo nella mia camera di fronte a questa pagina bianca, mi pervade un'angoscia talmente invadente da impedirmi di ordinare i pensieri e di metterli nero su bianco. Decido allora di esternarla nel tentativo di esorcizzarla e nella speranza di giustificarmi per queste parole di riconoscenza sicuramente non all'altezza della gratitudine che provo per voi, amici, colleghi e famigliari.

Le doctorat est un long voyage, une traversée de l'océan, parfois calme, parfois (souvent?) houleux. Et comme toutes les traversées, il n'est rendu possible que par un équipage exceptionnel. C'est pourquoi je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, Éric Séré, qui a partagé avec moi son expérience, ses astuces ainsi que ses intuitions d'excellent chercheur, dont j'ai toujours été admiratif.

Je suis reconnaissant aux rapporteurs, Christian Hainzl et Julien Sabin, ainsi qu'aux autres membres du jury, Isabelle Catto, Philippe Gravejat, Marcello Porta et Julien Toulouse, d'avoir consacré du temps à la lecture et à l'évaluation de ce manuscrit.

Parmi l'équipage d'exception qui a permis la réalisation de cette thèse, je pense plus particulièrement aux moyens humains (ainsi que financiers) mis en place par mon laboratoire, le Ceremade. Je remercie donc Anne-Laure, César et Isabelle pour tout le travail administratif qu'ils accomplissent au quotidien. Je remercie aussi Gilles, Marko, Philippe et Thomas pour leur supervision attentive des outils informatiques tout au long de ma thèse. Enfin, un gros merci à Vincent et Mathieu pour leur impeccable direction du laboratoire pendant ces trois années.

Je remercie la Fondation Sciences Mathématiques de Paris - FSMP pour avoir financé cette thèse de doctorat et pour m'avoir permis de faire partie de leur programme MathIn-Paris2020¹. Je remercie en particulier Ariela Briani et Mathieu Simon pour leurs efforts dans toute l'organisation pendant ces trois années.

Je remercie à nouveau Julien T. pour m'avoir accueilli au sein du LCT et pour m'avoir montré la beauté du merveilleux monde de la chimie quantique. Ta passion et ton enthousiasme pour la recherche ont été, sont et seront une source inamovible d'inspiration dans la suite de ma carrière scientifique. Je tiens aussi à remercier mes autres collaborateurs dans le domaine de l'électrodynamique quantique unidimensionnelle : Antoine, un volcan de questions et d'idées toujours brillantes, et Tim, mon fidèle compagnon de « QEDépression », qui m'a fait découvrir l'univers magique de la photographie animalière grâce à son

1. This research project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement N°945332.

euphorie. Je remercie aussi Maen, qui a toujours trouvé du temps pour répondre à mes questions (souvent naïves) sur la QED d'un point de vue un peu plus physique.

Non voglio dimenticare di esprimere la mia gratitudine a William per avermi supportato durante il mio secondo e terzo anno. Se sono arrivato in fondo a questo dottorato, è sicuramente in parte anche grazie a te e in particolare al tempo che mi hai dedicato e ai consigli e alle osservazioni che mi hai sempre offerto sul piano scientifico così come su quello personale.

Cette thèse n'aurait pas été possible sans la très bonne ambiance générale parmi les doctorants et les post-doctorants du laboratoire. Je remercie donc tous ceux que j'ai eu à côtoyer dans les bureaux, dans les couloirs, au Crous ainsi qu'en dehors de l'université : Adechola, Amal, Animesh, Antoine (x2), Brune, Camilla, Camilo, Cesar, Changqing, Charly, Claudia, Donato, Emma, Federico, Hugo, Jean-Paul, João, Kathi, Laura, Luca, Lucas (x2), Lukasz, Michal, Quan, Raphaël (x2), Richard, Rodrigue, Ryad, Ruihua, Samuel, Thaddeus, Tommy, Yueh-Sheng. Et en particulier, merci à Adrien pour son soutien dans ma bataille contre la paperasserie française tout au long de ma thèse. Merci à Jean qui a toujours été disponible pour discuter et répondre à mes questions pendant ma première année (je n'ai toujours pas oublié ton énorme disponibilité!). Merci à Lorenzo pour nos échanges à la fois très intéressants et (souvent) subtilement ironiques. Et merci à Théo, le daron des doctorants du Ceremade, je te souhaite le mieux pour la suite.

Un paragrafo a parte lo dedico alla squadra dei dottorandi italiani che ha sempre rappresentato un solido rifugio in questi anni, quando la malinconia di casa tornava a farsi sentire. Grazie allora ad Adelaide, la mia compagna di "manif" e di discussioni politiche ed economiche. Grazie ad Anna, la cui risata contagiosa ha sempre saputo tirarmi su il morale. Grazie a Carmen, la cui energia travolgente è atterrata a Parigi sempre al momento opportuno. Grazie a Chiara che, nonostante la nostra disorganizzazione, è sempre rimasta presente e mi ha iniziato all'arte della giocoleria. Grazie a Daniele (nonché ad Eugi e alla Nelli), il quale mi ha insegnato che Parigi è bella, ma che i tre mesi estivi tutto sommato è meglio trascorrerli in Italia. Un enorme grazie a Florin che ha saputo accogliere e trasformarsi in porto sicuro soprattutto negli ultimi mesi quando molte delle mie certezze avevano cominciato a vacillare. E infine grazie a Gio, la cui disponibilità all'ascolto e cordialità non hanno mai smesso di sorprendermi.

Ringrazio Dom per avermi sempre sostenuto anche quando ho rischiato di ritrovarmi solo. Sei una gran bella persona e auguro a te, e a Marie, tutta la serenità possibile, ovunque voi decidiate di stabilirvi.

Je tiens à remercier tous mes amis de la Cité Universitaire. Même si la plupart d'entre eux sont partis ou ont été absorbés par la routine parisienne, ils ont tous joué un rôle très important, surtout pendant ma première année à Paris. Et donc un grand merci à Farid, Giulia, Hannah (x2), Ignacio, Luigi, Marco, Polina, Rose, Sebla et Tanya. En particulier, je remercie Hadley avec qui j'ai pu assister à autant d'expositions que de soirées à Paris. Je remercie aussi Valou, mon amie alsacienne et philosophe de l'art du « balekage », dont la maîtrise m'échappe toujours.

Je remercie Ari, Ceci, Giova et Margy, mes amis Erasmus, que j'ai eu l'opportunité de retrouver à Paris pendant ces trois années et avec qui j'ai toujours passé d'agréables soirées.

Je remercie Loïc, mon garant, sans lequel je n'aurais jamais eu un logement à Paris. J'ai toujours apprécié ton aimable hospitalité et j'espère pouvoir rendre ta gentillesse bientôt. Tu seras toujours le bienvenu en Italie, notamment à Bologne!

Je remercie Guillermo, mon coloc à Villa Adrienne Simon pendant huit mois et demi.

C'est grâce à toi si, après plus de quatre mois de recherche, j'ai enfin trouvé un logement à Paris. J'ai toujours été impressionné par ta transparence et ton honnêteté.

Je remercie mon professeur d'acroyoga, Fernando, qui a su me transmettre sa passion pour cette discipline merveilleuse et qui n'a pas hésité à m'inclure dans leur communauté d'acrobates enthousiastes. Je suis sûr que nous continuerons à nous croiser aux Reçois en France et - pourquoi pas ? - ailleurs.

Apprestandomi a concludere questi lunghi ringraziamenti, ho deciso di menzionare in fondo, come le radici più solide di un albero secolare che cercano la profondità, tutte quelle persone che hanno rappresentato e rappresentano le fondamenta robuste su cui è stato possibile edificare questa esperienza lontano da casa, partendo oramai più di tre anni fa.

Ringrazio allora tutti i miei amici matematici con cui ho condiviso il percorso triennale e magistrale: Beppe, Ettore, Evi, Forno, Gaia, Marco, Nico, Sacha, Simo e Trebe. Non sapete quanto mi riempia di gioia vedere che in questi anni, nonostante oramai solo pochi di noi siano ancora stabilmente a Bologna, non abbiate mai esitato a seguirmi nelle mie proposte di ~~vacanza~~ *viaggio*. Vedere che queste avventure itineranti si siano affermate come una sorta di tradizione estiva ha per me un valore inestimabile. Ringrazio anche Luca e Mara che, nonostante la distanza ci separi da ancor più anni, continuano a dimostrarsi amici leali e instancabili. Quando la smetterete di sorprendermi?

Ringrazio i miei amici sempre presenti dai tempi del liceo: Michi, Nico (di nuovo lui!) e Panni. Il nostro BombardGruppo esiste e resiste fin dal 2012 e rappresenta quel faro che ogni marinaio vorrebbe avvistare rientrando a casa. Dedico inoltre una menzione ulteriore a Michi, migliore amico e fratello acquisito. Ricordo ancora la strana sensazione di quell' "arrivederci" di poco più di tre anni fa, dopo essere andati a correre assieme su per la Croara. Molti erano i timori che dominavano i miei pensieri prima di quella partenza, ma la nostra Amicizia è riuscita in fretta a rassicurarmi e ad allontanarli. Siamo riusciti a guardare film, serie TV e a continuare ad aggiornarci sulla nostra quotidianità anche a 842km di distanza² e questo conferma che il nostro rapporto si fonda su un legame veramente speciale.

Ringrazio Elena per la sua dolcezza e la sua pazienza. Il tempo trascorso assieme mi diverte, mi rilassa e mi fa sentire al sicuro.

Ringrazio la zia Ale che, nonostante la lontananza, non mi ha mai fatto mancare il suo entusiasmo e la sua ironia. Ringrazio ugualmente lo zio Paolo per la devozione e il rispetto per la montagna che ha seminato in me fin da piccolo. Questi insegnamenti hanno oggi solide radici e continuerò a coltivarli come ho fatto negli ultimi anni.

E infine grazie a voi, mamma, papi ed Edo, voi che col vostro Amore mi date sempre tutto il supporto di cui ho bisogno. Voi siete il cielo stellato che mi ha permesso di mantenere la rotta e compiere questa traversata, anche nelle notti più tempestose. Questo traguardo è anche e soprattutto merito vostro.

Paris, le 29 septembre 2024.

Umberto

2. In linea d'aria.

Some non-linear models on the Dirac vacuum**Abstract**

Cette thèse de doctorat est principalement consacrée à l'étude mathématique du vide de Dirac, potentiellement en présence d'un champ électromagnétique et d'électrons. Ce système est décrit à l'aide de modèles non linéaires issus d'approximations de champ moyen de l'électrodynamique quantique. Dans le Chapitre 2, on étudie la dynamique d'un nombre fini d'électrons relativistes interagissant avec un nombre fini de noyaux classiques dans la mer de Dirac, en prouvant que le problème de Cauchy correspondant est globalement bien posé. Dans le Chapitre 3, on fournit la première dérivation rigoureuse du lagrangien magnétique effectif à une boucle à température positive, une fonctionnelle non linéaire décrivant l'énergie libre du vide de Dirac dans un champ magnétique classique. Finalement, dans le Chapitre 4, on présente quelques résultats numériques concernant un modèle unidimensionnel décrivant un atome hydrogénoïde relativiste. En particulier, on propose une approche pour calculer la polarisation du vide ainsi que le décalage de Lamb dans une approximation de base finie.

Keywords: non-linear analysis, quantum electrodynamics, Hartree-Fock, mean-field approximation, Dirac sea, ultraviolet regularisation

Some non-linear models on the Dirac vacuum**Abstract**

This doctoral thesis is mainly devoted to the mathematical study of the Dirac vacuum, potentially in presence of an electromagnetic field and a finite number of electrons. This system is described by means of non-linear models originating from mean-field approximations of quantum electrodynamics. In Chapter 2, we study the dynamics of a finite number of relativistic electrons interacting with finitely many classical nuclei in the Dirac sea, by proving a global well-posedness result for the corresponding Cauchy problem. In Chapter 3, we provide the first rigorous derivation of the one-loop effective magnetic Lagrangian at positive temperature, a non-linear functional describing the free energy of the Dirac vacuum in a classical magnetic field. Finally, in Chapter 4, we present some numerical results concerning a one-dimensional model describing a relativistic hydrogen-like atom. In particular, we present an approach to compute the vacuum polarisation as well as the Lamb shift in a finite basis set approximation.

Keywords: non-linear analysis, quantum electrodynamics, Hartree-Fock, mean-field approximation, Dirac sea, ultraviolet regularisation

Contents

Remerciements/Ringraziamenti	xiii
Abstract	xvii
Contents	xix
1 Introduction	1
1.1	Cadre physique 1
1.2	L’approximation de champ moyen en mécanique quantique rela- tiviste 9
1.3	Présentation des résultats du Chapitre 2 29
1.4	Présentation des résultats du Chapitre 3 32
1.5	Présentation des résultats du Chapitre 4 36
1.6	Conclusions et perspectives 41
2 Relativistic electrons coupled with Newtonian nuclear dynamics	43
1	Introduction 45
2	The general setting and main result 50
3	Local existence 52
4	Uniqueness 59
5	Global-in-time existence 60
3 The free energy of Dirac’s vacuum in purely magnetic fields	63
1	Introduction 65
2	Derivation of the model and main results 68
3	Rigorous definition of the PV-regularised free energy functional 76
4	The regime of slowly varying magnetic fields: proof of Theo- rem 3.3 85
4 Vacuum polarisation in a one-dimensional effective QED model	91
1	Introduction 93
2	Exact 1D hydrogen-like Dirac model 94
3	Finite dimensional approximation to the 1D hydrogen-like Dirac model 104
4	Conclusion 110
Appendix A.	Matrix elements of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian 110
Appendix B.	Approximation of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian with regular potentials 113
Appendix C.	Rate of convergence of the bound state energy in a plane wave basis 115

Bibliography

117

Introduction

Cette thèse est consacrée à l'étude mathématique et numérique de la matière dans un cadre relativiste. On considère des modèles non linéaires, issus de l'électrodynamique quantique (QED) et décrivant le comportement du vide de Dirac interagissant avec des champs électromagnétiques classiques extérieurs, dans le cas non stationnaire ainsi que dans le cas à température non nulle.

1.1 Cadre physique

Dans cette section, on introduit le cadre physique de l'étude de la matière dans un cadre relativiste. On commence par donner quelques motivations de l'importance des effets relativistes en chimie quantique, notamment dans l'étude des atomes lourds. On introduit donc l'opérateur de Dirac décrivant l'énergie cinétique d'une particule de spin 1/2 dans le cadre de la relativité restreinte. On discute ensuite des conséquences entraînées par le spectre de cet opérateur. Il s'avère que la théorie physique correcte pour décrire la matière dans un cadre relativiste est l'électrodynamique quantique.

1.1.1 Les effets relativistes en chimie quantique

La chimie quantique est une branche de la chimie théorique qui applique la mécanique quantique aux systèmes moléculaires pour en étudier les propriétés chimiques. Dans le cadre de la relativité restreinte, la masse d'une particule (telle qu'un électron) augmente avec sa vitesse selon la formule suivante:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}},$$

où m_0 est la masse au repos, v la vitesse de l'électron et c la vitesse de la lumière, ce qui entraîne que le *rayon de Bohr*¹,

$$a_0 = (4\pi\epsilon_0) \frac{\hbar^2}{me^2},$$

1. Dans le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène, le rayon de Bohr est la longueur caractéristique séparant l'électron de la couche 1s du proton (le noyau). Dans l'approche quantique de la description de l'atome, il représente la valeur moyenne dans le temps de la distance entre l'électron et le noyau.

décroît pour les électrons de la couche interne ayant une vitesse moyenne élevée. On peut montrer que la vitesse moyenne de l'électron dans la *couche de valence*² d'un *atome hydrogénoïde*³ non relativiste est donnée par⁴

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = (\alpha Z) c,$$

où $\alpha \simeq 1/137$ est la *constante* (sans dimension) *de structure fine* et Z le numéro atomique. Ainsi, par exemple, pour l'électron dans la couche 1s d'un atome de mercure hydrogénoïde ($Z = 80$), on a $\langle v^2 \rangle \simeq 0.58c$, ce qui implique une contraction radiale de 23%. Comme les couches supérieures doivent être orthogonales aux couches inférieures, elles subiront une contraction similaire. En raison des effets relativistes et des effets de structure des couches interagissant entre elles, leur contraction peut devenir encore plus significative [Pyy88]. Cependant, ceci n'est vrai que pour les couches s et p. Pour les couches d, on peut avoir un effet de dilatation dû à l'écrantage plus important de la charge nucléaire par les orbitales s et p contractées [Pyy12]. Ce simple argument indique de manière claire que les effets relativistes ne sont plus négligeables dans le cas d'atomes lourds. Par exemple, les effets relativistes pour l'électron de valence d'un atome d'or ($Z = 79$) entraînent notamment la modification des niveaux d'énergie pour passer d'une couche électronique à l'autre, d'où la couleur dorée aussi caractéristique de l'or. De même pour l'élément à côté dans le tableau périodique (le mercure, $Z = 80$), c'est une fois de plus à cause des effets relativistes que la liaison entre atomes est suffisamment faible pour permettre au mercure d'être liquide à température ambiante.

En 1928, le physicien britannique Paul Dirac introduit une théorie quantique relativiste qui prend en compte une grande partie des effets négligés par la théorie quantique de Schrödinger⁵. Les effets relativistes en chimie quantique peuvent donc être considérés comme des perturbations à la théorie non relativiste de la chimie, développée à partir des solutions de l'*équation de Schrödinger*. Cependant, le remplacement de cette dernière par l'équation de Dirac soulève plusieurs questions d'ordre physique, mathématique et numérique qui seront discutées en détail dans la suite de cette thèse. En outre, l'équation de Dirac est incapable de prédire en particulier deux phénomènes quantiques importants:

1. Le *moment magnétique de spin de l'électron*: l'équation de Dirac prédit pour l'électron un *facteur de Landé*⁶ exactement égal à -2 , tandis que la valeur expérimentale vaut actuellement environ -2.00231930436 [HFG11].
2. Le *décalage de Lamb* [LR47]: il s'agit de la différence d'énergie entre les états $2s_{\frac{1}{2}}$ et $2p_{\frac{1}{2}}$ de l'atome d'hydrogène (voir Fig. 1.1). Ce décalage n'est pas prédit par l'équation de Dirac, qui donne la même énergie à ces deux états.

Il s'avère que la théorie correcte est l'*électrodynamique quantique* (QED), une théorie quantique des champs décrivant l'interaction entre matière et lumière. Elle permet de

2. La couche de valence d'un atome est sa dernière couche électronique partiellement ou totalement remplie. Ce sont les électrons dans cette couche, appelés *électrons de valence*, qui interviennent dans les liaisons chimiques.

3. Il s'agit d'un atome ou d'un ion avec un seul électron.

4. Cette formule peut être facilement montrée pour le modèle de Schrödinger de l'atome hydrogénoïde, en calculant la valeur moyenne de l'opérateur vitesse sur l'état propre 1s du hamiltonien à l'aide éventuellement du théorème du viriel.

5. L'équation de Schrödinger, introduite par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1926, décrit l'évolution dans le temps d'un système quantique non relativiste.

6. Dans le cas d'une particule fondamentale, les moments cinétique et magnétique de spin ne sont pas dans un rapport qui ne dépend que de la charge q et de la masse m , et l'on introduit un nombre sans dimension g , appelé facteur de Landé, tel que $\vec{\mu}_S = \frac{gq}{2m} \vec{S}$, où \vec{S} est le spin et $\vec{\mu}_S$ est le moment magnétique de spin.

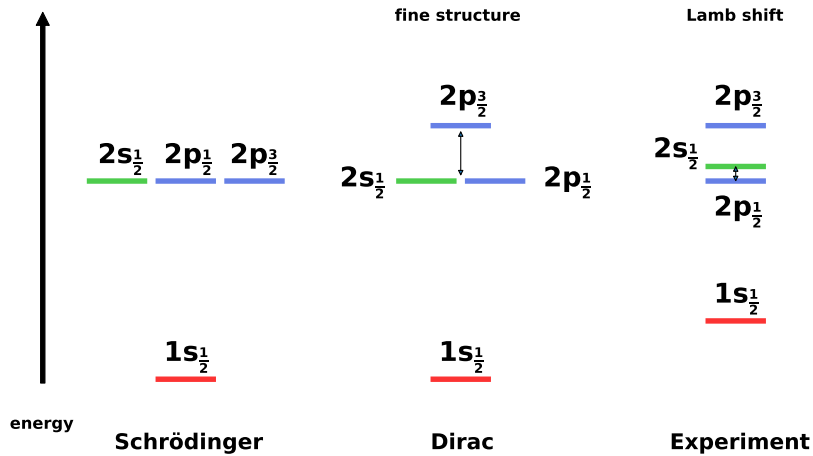


Figure 1.1 – Comparaison entre les spectres prédits et celui expérimental. Credit: M. Salman.

déterminer le comportement de particules chargées (telles que les électrons dans un atome ou une molécule) couplées avec les photons.

La QED est une des théories les plus réussies et précises de l'histoire de la physique. Déjà étudiée par Dirac, Pauli, Wigner, Jordan, Heisenberg et Fermi, qui introduit une première formulation élégante de l'électrodynamique quantique, on parvient à une formulation définitive grâce aux travaux de Bethe, Dyson, Feynman, Schwinger et Tomonaga entre 1946 et 1950. Tomonaga, Schwinger et Feynman reçoivent en 1965 le prix Nobel de physique pour leur contribution à cette théorie, en particulier par la mise au point du calcul des quantités observables en utilisant la covariance et l'invariance de jauge.

1.1.2 L'opérateur de Dirac

Comme déjà mentionné, dès que les effets relativistes doivent être considérés pour des particules de spin demi-entier telles que les électrons, l'opérateur de Dirac apparaît naturellement à la place de l'opérateur de Schrödinger en soulevant un certain nombre de difficultés supplémentaires qui seront discutées en détail dans la suite de ce manuscrit, y compris dans cette sous-section. On commence par dériver l'opérateur de Dirac décrivant la dynamique relativiste d'une particule de spin 1/2 dans \mathbb{R}^3 . Des introductions plus détaillées sont exposées dans les livres de Dirac [Dir58] et de Bjorken et Drell [BD64]. Pour une discussion plus mathématique on renvoie au livre de Thaller [Tha92].

Dérivation de l'opérateur de Dirac libre

Formellement la transition de la mécanique classique à la mécanique quantique peut être réalisée en remplaçant les observables classiques par des opérateurs appropriés. Normalement ces opérateurs sont des opérateurs différentiels ou de multiplication agissant sur des fonctions d'onde dans un espace de Hilbert. En particulier, pour l'énergie E et l'impulsion p d'une particule libre, on a les remplacements suivants (voir [Dir58, Chapter IV] pour un argument autour de la première quantification):

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \\ p &\rightarrow -i\hbar \nabla, \end{aligned} \tag{1.1}$$

où \hbar est la *constante de Planck réduite*⁷. Ces substitutions étant compatibles avec l'invariance de Lorentz, elles conviennent à la recherche d'un équivalent de l'équation de Schrödinger dans un cadre relativiste. En les appliquant à la relation relativiste d'énergie-impulsion⁸,

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}, \quad (1.2)$$

on obtient la racine carrée de l'opérateur de Klein-Gordon⁹,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \sqrt{-c^2 \hbar^2 \Delta + m^2 c^4} \psi(t, x), \quad t \in \mathbb{R}, \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (1.3)$$

où $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ est l'opérateur laplacien. Éq. (1.3) implique plusieurs difficultés. D'abord, la racine carrée d'un opérateur différentiel donne lieu à un opérateur non local. De plus, l'asymétrie des dérivées d'espace et de temps ne garantit pas l'invariance de Lorentz et ne permet pas d'inclure un champ électromagnétique extérieur de façon relativiste. Pour éviter ces problèmes, on peut appliquer les remplacements (1.1) au carré de la relation relativiste d'énergie-impulsion,

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4,$$

en obtenant la célèbre *équation de Klein-Gordon*,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(t, x) = (-c^2 \hbar^2 \Delta + m^2 c^4) \psi(t, x).$$

On remarque qu'en considérant le carré de (1.2) on a ajouté une racine d'énergie négative $E = -\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$: afin de dériver une équation plus simple, on obtient donc une énergie qui n'est plus définie positive. Cependant, ces solutions d'énergie négative peuvent être physiquement interprétées en introduisant la notion d'antiparticule qui a été ensuite largement supportée par les observations expérimentales. On reviendra sur ce sujet dans la prochaine sous-section. De toute façon, l'équation de Klein-Gordon est encore insatisfaisante d'un point de vue physique pour deux raisons principales. La première est qu'elle agit sur des fonctions d'onde scalaires, en négligeant donc la structure interne de l'électron, c'est-à-dire le *spin*. La deuxième est que l'équation d'évolution dans le temps d'un système quantique devrait présenter une dérivée temporelle du premier ordre, par analogie avec l'équation de Schrödinger. Autrement, l'interprétation probabiliste de l'équation devient problématique, en donnant lieu à une densité de probabilité non positive.

Pour toutes ces raisons, on revient à Éq. (1.2) et avant d'appliquer les remplacements (1.1) on peut la linéariser en obtenant

$$E = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i + \beta m c^2 = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2, \quad (1.4)$$

où les coefficients $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ et β doivent être déterminés en comparant E^2 confor-

7. $\hbar = h/2\pi$.

8. Il s'agit de la généralisation de l'équivalence masse-énergie $E = mc^2$ à des systèmes à impulsion non nulle.

9. La racine carrée d'un opérateur différentiel peut être définie grâce au calcul pseudo-différentiel à l'aide de la transformée de Fourier.

mément à (1.2) et (1.4). Par conséquent, on obtient les relations suivantes:

$$\begin{aligned}\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i &= 2\delta_{ik}\mathbf{1}, \quad i, k = 1, 2, 3, \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i &= \mathbf{0}, \quad i = 1, 2, 3, \\ \beta^2 &= \mathbf{1},\end{aligned}\tag{1.5}$$

avec δ_{ik} le *symbole de Kronecker*¹⁰ et $\mathbf{0}$ et $\mathbf{1}$ les éléments neutres respectivement de la somme et du produit de l'algèbre¹¹ définie par (1.5). Cette algèbre étant non commutative, on peut essayer d'en trouver une représentation dans l'espace des matrice $n \times n$. Dans ce cas, les matrices α et β doivent d'abord être hermitiennes afin que (1.4) soit auto-adjoint (ce qui est nécessaire dans le cadre de la mécanique quantique). Concernant la taille n de ces matrices, on remarque que $\alpha_i^2 = \mathbf{1}$ implique que les valeurs propres de α_i soient ± 1 . De plus, à partir de (1.5) on obtient que

$$\text{Tr } \alpha_i = \text{Tr } \beta^2\alpha_i = -\text{Tr } \beta\alpha_i\beta = -\text{Tr } \alpha_i\beta^2 = -\text{Tr } \alpha_i = 0,$$

ce qui impose que la taille n des matrices soit un nombre pair. Pour $n = 2$, il y a au plus 3 matrices linéairement indépendantes qui anticommulent, ce qui implique qu'en considérant par exemple les matrices de Pauli en tant que α_i ,

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

il ne reste plus de la place pour le choix de β . Par contre, pour $n = 4$ les relations (1.5) peuvent être satisfaites par plusieurs choix de α et β . La représentation standard, introduite par Dirac, est donnée par

$$\beta = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}, \quad \alpha_k = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, 3.$$

Cette représentation donne lieu à l'équation suivante:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, x) = D_m^0\psi(t, x),\tag{1.6}$$

où D_m^0 est l'*opérateur de Dirac* donné explicitement par

$$D_m^0 = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 = \begin{bmatrix} mc^2 I_2 & -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -mc^2 I_2 \end{bmatrix},$$

avec $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$. L'équation (1.6) conduit naturellement à l'interprétation de D_m^0 comme le hamiltonien d'un électron libre relativiste. D_m^0 est un opérateur différentiel matriciel 4×4 agissant sur des fonctions d'onde à valeurs vectorielles, appelées *spineurs*,

$$\psi(t, x) = \begin{bmatrix} \psi_1(t, x) \\ \psi_2(t, x) \\ \psi_3(t, x) \\ \psi_4(t, x) \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^4,$$

10. $\delta_{ik} = 1$ si $i = k$; $\delta_{ik} = 0$ si $i \neq k$.

11. Une algèbre A sur un corps commutatif K est une structure algébrique $(A, +, \cdot, \times)$ telle que: 1) $(A, +, \cdot)$ est un espace vectoriel sur K ; 2) la loi \times est définie de $A \times A$ dans A et est bilinéaire.

permettant donc de tenir en compte le spin de la particule considérée, ce qui était un des défauts de l'équation de Klein-Gordon. On choisit donc l'espace de Hilbert suivant:

$$\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})^4 \simeq L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4) \simeq L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^4.$$

On conclut cette sous-section en définissant l'opérateur de Dirac libre,

$$D_m^0 \psi = -ic\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta mc^2 \psi, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(D_m^0),$$

dans un domaine $\text{Dom}(D_m^0)$ approprié. À cet effet, on a le résultat suivant:

Théorème 1.1 ([Tha92, Theorem 1.1]). *L'opérateur de Dirac libre est essentiellement auto-adjoint dans le domaine dense $C_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})^4$ et auto-adjoint dans l'espace de Sobolev suivant:*

$$\text{Dom}(D_m^0) = H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})^4.$$

Son spectre est absolument continu et donné par

$$\sigma(D_m^0) = (-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty).$$

Champs électromagnétiques extérieurs

En mécanique classique, la *prescription de couplage minimal*¹² explique comment dériver les forces par lesquelles un champ agit sur une particule. En particulier, si $H(p)$ est le hamiltonien d'une particule libre classique, alors $H(p - \frac{e}{c}A(ct, x)) + eV(ct, x)$ est le hamiltonien d'une particule de charge e dans un champ électromagnétique donné, où $\mathbf{A} = (V, A)$ est le potentiel électromagnétique associé. En appliquant cette prescription à l'opérateur de Dirac libre dérivé précédemment, on obtient l'opérateur de Dirac en présence d'un champ électromagnétique extérieur,

$$D_m^{e\mathbf{A}} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}A(ct, x) \right) + eV(ct, x) + \beta mc^2.$$

Dans ce cadre physique, il est naturel d'introduire (dans la jauge de Coulomb) l'espace de Sobolev homogène suivant:

$$\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3) = \left\{ \mathbf{A} = (V, A) \in L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4) \mid \text{div}A = 0 \right. \\ \left. \text{and } \mathbf{F} = (-\nabla V, \text{curl}A) \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6) \right\},$$

muni de la norme

$$\|\mathbf{A}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\nabla V\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\text{curl}A\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\mathbf{F}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2.$$

On a donc le résultat spectral suivant:

Théorème 1.2 ([Gra+13, Lemma 2.1]). *Soit $e, m > 0$.*

12. Normalement deux champs interagissent à travers plusieurs multipôles. Si l'on ne considère que l'interaction dû au monopôle en négligeant les moments multipolaires d'ordre supérieur de la distribution de charge, on parle de « couplage minimal ». Dans le cas d'un électron dans un champ électromagnétique, le couplage minimal prend en compte seulement le mouvement orbital et non pas le spin.

(i) Un potentiel $\mathbf{A} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ est D_m^0 -compact. L'opérateur $D_m^{e\mathbf{A}}$ est auto-adjoint sur $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ et son spectre essentiel est

$$\sigma(D_m^{e\mathbf{A}}) = (-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty).$$

(ii) Les valeurs propres de $D_m^{e\mathbf{A}}$ sont des fonctions lipschitziennes de \mathbf{A} dans la norme de $\|\mathbf{A}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)}$.

(iii) Il existe une constante universelle C telle que, si

$$\|\mathbf{A}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)} \leq \eta\sqrt{m},$$

pour quelque $\eta < 1/C$, alors

$$\sigma(D_m^{e\mathbf{A}}) \cap (-mc^2(1 - C\eta), (1 - C\eta)mc^2) = \emptyset.$$

(iv) Si $V \equiv 0$, alors $\sigma(D_m^{e\mathbf{A}}) \cap (-mc^2, mc^2) = \emptyset$.

Les états d'énergie négative: la mer de Dirac

Comme vu précédemment, le spectre de l'opérateur de Dirac libre est symétrique par rapport à 0 et donc il contient en particulier une partie négative qui n'est pas bornée par dessous. Cela signifie que l'équation de Dirac autorise aussi bien des états d'énergie négative que positive, en conduisant à des difficultés mathématiques, physiques et numériques très importantes. L'existence de solutions à énergie négative mène à une réinterprétation complète de la théorie de Dirac afin d'éviter que les électrons atomiques puissent tomber dans des états d'énergie négative par l'émission de photons. On peut tenter de résoudre ce problème en négligeant le champ radiatif, ce qui nous empêcherait de calculer les propriétés atomiques de la matière à un haut degré de précision. Un électron dans l'état fondamental d'un atome d'hydrogène a une vitesse de transition vers un état d'énergie négative qui peut être calculée grâce à la théorie semi-classique de la radiation. Cette vitesse pour une transition vers l'intervalle d'énergie $[-2mc^2, -mc^2]$ est égale à $\frac{2\alpha^6 mc^2}{\pi\hbar} \simeq 10^8 \text{s}^{-1}$ et tend vers l'infini si tous les états d'énergie négative sont pris en compte, ce qui est évidemment absurde [BD64].

Il est donc clair qu'il faut trouver une interprétation des états d'énergie négative différente de celle suggérée par la théorie de Schrödinger à un corps. En 1930, Dirac postule la théorie suivante [Dir30]: en accord avec le principe d'exclusion de Pauli, si l'électron se trouve nécessairement dans un état d'énergie positive, c'est que tous les états d'énergie négative sont déjà occupés par des particules virtuelles. L'état du vide est donc celui avec tous les niveaux électroniques d'énergie négative remplis et tous ceux d'énergie positive vides. Cela implique que le vide est en réalité composé d'une infinité de particules virtuelles qui occupent les états à énergies négatives de l'opérateur de Dirac libre. Cette infinité de particules d'énergie négative est appelée *mer de Dirac*. La mer de Dirac est supposée être complètement inobservable à cause de son uniformité. À cet effet, Dirac écrit en 1934 [Dir34b]:

We make the assumption that, in the world as we know it, nearly all the states of negative energy for the electrons are occupied, with just one electron in each state, and that a uniform filling of all the negative-energy states is completely unobservable to us.

Cette théorie du vide a des conséquences très intéressantes. D’abord, sous l’action d’un champ électromagnétique, un électron d’énergie négative peut effectuer une transition à un état d’énergie positive. Dans ce cas, on observe un électron de charge $-e$ et énergie $+E$ et en plus un « trou » apparaît dans le vide. Ce trou correspond à l’absence d’un électron de charge $-e$ et énergie $-E$ et peut être interprété comme la présence d’une particule de charge $+e$ et énergie $+E$ par un observateur ayant le vide comme référence. Ces particules ont été observées expérimentalement quelques années plus tard par Anderson: il s’agit des *positrons* [And32; And36]. Réciproquement, un trou dans la mer de Dirac, ou un positron, peut « attraper » un électron d’énergie positive en conduisant à l’annihilation d’une paire électron-positron avec émission de radiation.

L’équation de Dirac est valable pour les électrons mais aussi pour toute autre particule de spin $1/2$, comme par exemple les protons et les neutrons. Comme dans le cas de l’électron et du positron, on peut supposer que toute particule décrite par l’équation de Dirac ait une antiparticule ayant charge opposée mais même masse et même spin. Dans [Dir33], Dirac prédit l’existence de l’antiparticule du proton; en 1955, en utilisant un nouvel accélérateur de particules, Segrè et Chamberlain avec leur groupe découvrent l’antiproton [Cha+55] et, en 1956, Cork avec son équipe découvre l’antineutron [Cor+56], ouvrant la voie à la mise en évidence d’autres antiparticules.

La polarisation du vide

En 1934, Dirac [Dir34a] et Heisenberg [Hei34] prédisent en plus le phénomène de la polarisation du vide. À partir des intuitions de Dirac et en accord avec la théorie quantique des champs, on sait que le vide est un milieu fluctuant, plutôt qu’un espace vide, où des paires de particule-antiparticule virtuelles apparaissent et disparaissent. On sait que ces paires n’ont aucun impact mesurable sur les processus physiques [GR96, Ch. 8]. Toutefois, ces paires de particule-antiparticule virtuelles peuvent apparaître aussi quand un photon se propage (voir Fig.(1.2)) et dans ce cas les effets sur les processus physiques sont mesurables. Les paires de particule-antiparticule se comportent comme des dipôles électriques: en présence d’un champ électrique, tel que le champ électromagnétique autour d’un électron ou d’un noyau, elles s’alignent en donnant lieu à un partiel écrantage du champ extérieur. Le vide acquiert ainsi une densité de charge non constante. Les effets de la polarisation du vide ont été calculés au premier ordre dans la constante de couplage par Serber [Ser35] et Uehling [Ueh35] en 1935.

La polarisation du vide est négligeable dans le calcul du décalage de Lamb pour l’atome d’hydrogène ordinaire, mais elle joue un rôle majeur dans les atomes lourds [MPS98; Sha02, Ch. 9] ainsi que dans les atomes muoniques [FE54; GRS60]. De plus, en présence d’un champ électrique très fort, une paire électron-positron peut apparaître [Nen87; RG77; RGA71; RMG81]. D’ailleurs, on a déjà mentionné l’importance des effets relativistes pour ces systèmes chimiques. Cependant, la description d’une théorie relativiste analogue à celle non relativiste à N corps est un problème très compliqué. En effet, le remplacement de l’opérateur de Schrödinger par l’opérateur de Dirac (dans une approximation de champ moyen ou non) conduit à des théories très mal définies à cause du spectre de ce dernier qui n’est pas borné par dessous. Comme l’on a déjà cité, la théorie correcte est la QED qui permet de décrire l’interaction entre lumière et matière à un très haut niveau de précision. Ce degré d’exactitude se repose sur la théorie de la perturbation, ce qui réduit l’éventail de situations physiques que l’on peut décrire par cette théorie. Une formulation non perturbative et mathématiquement cohérente de la QED demeure inconnue et il s’agit donc d’un problème ouvert très intéressant. Pour toutes ces raisons, plusieurs approximations

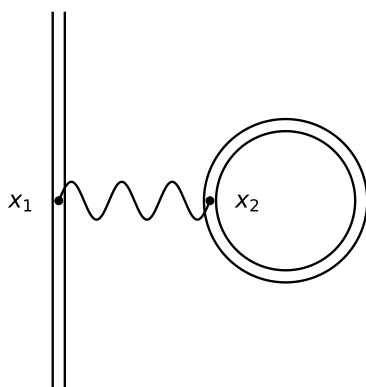


Figure 1.2 – Le diagramme de Feynman à une boucle représentant l'interaction entre un électron en x_1 et une paire virtuelle en x_2 . Credit: M. Salman.

de champ moyen ont été proposées et étudiées dans les dernières décennies. Tout cela fera objet de la section suivante.

1.2 L'approximation de champ moyen en mécanique quantique relativiste

Dans cette section, on introduit le formalisme que l'on utilisera pour décrire le vide de Dirac (ainsi que la matière dans certains cas) interagissant avec des champs électromagnétiques classiques. On décrit donc quelques modèles simplifiés issus de l'électrodynamique quantique et prenant en compte le phénomène de la polarisation du vide. Contrairement à la QED, ces modèles sont totalement non perturbatifs: la constante de structure fine α est fixée et le vide polarisé est construit à l'aide de méthodes variationnelles. Ces approximations reposent sur le papier fondamental de Chaix et Iracane [CI89], où les auteurs fournissent un cadre de champ moyen pour l'analyse des effets dus à la polarisation du vide. Le lectorat intéressé peut consulter les revues [ELS08; Gra+12].

Formellement, il s'agit d'une application de la méthode de Hartree-Fock au hamiltonien de la QED. Pour cette raison, on commence par introduire brièvement cette méthode pour l'étude d'un système non relativiste à N corps. Une introduction plus détaillée écrite en français est exposée dans le livre de Cancès, Le Bris et Maday [CLM06]. Pour une référence en langue anglaise, on renvoie à la revue de Le Bris et Lions [LL05].

On passe ensuite rapidement à l'analogue relativiste, c'est-à-dire le modèle de Dirac-Fock, afin de montrer que plusieurs difficultés mathématiques, physiques et numériques apparaissent quand on considère les effets relativistes tout en négligeant ceux de la QED. En particulier, l'état fondamental ne peut pas être défini comme un minimum de la fonctionnelle d'énergie comme cette dernière n'est pas bornée par dessous. On pourra enfin décrire l'approximation de champ moyen en électrodynamique quantique.

1.2.1 Le modèle de Hartree-Fock

Afin d'introduire l'approximation de Hartree-Fock, on peut commencer par introduire le hamiltonien à N corps suivant:

$$H_V^N = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\Delta_{x_i}}{2m} + eV(x_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{|x_i - x_j|}, \quad (1.7)$$

dont la forme quadratique associée décrit l'énergie de N électrons interagissant entre eux et avec le potentiel V . Fréquemment, V est le potentiel électrostatique de Coulomb créé par une distribution positive de charge $\nu > 0$ de charge totale Z :

$$V = -e\nu * \frac{1}{|x|}, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z.$$

Dans le cas de M noyaux ponctuels de charge $z_1, \dots, z_M > 0$ et situés respectivement en $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M \in \mathbb{R}^3$, on choisit $\nu = \sum_{m=1}^M z_m \delta_{\bar{x}_m}$ et $Z = \sum_{m=1}^M z_m$. On peut aussi considérer des noyaux non ponctuels en supposant que ν soit une fonction non négative, lisse et intégrable. En accord avec le principe de Pauli, l'opérateur H_V^N agit sur l'espace des fonctions à carré intégrable et antisymétriques par permutations des labels,

$$\bigwedge_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3 \times \{\pm\}, \mathbb{C}).$$

Les structures électroniques possibles correspondent aux fonctions propres du hamiltonien H_V^N et donc en particulier la structure de l'état fondamental correspond à la valeur propre minimale. Pourtant, l'analyse spectrale de H_V^N demeure très compliquée (voir [RS78; HS00]) et par conséquent plusieurs approximations ont été proposées pour en simplifier la description¹³.

Dans la méthode de Hartree-Fock [Har28; Foc30], on calcule une approximation de la valeur propre minimale de H_V^N en restreignant la forme quadratique $\Phi \mapsto \langle \Phi, H_V^N \Phi \rangle$ à l'ensemble des fonctions qui s'écrivent sous forme de *déterminant de Slater*,

$$\Phi(x_1, \sigma_1, \dots, x_N, \sigma_N) = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N(x_1, \sigma_1, \dots, x_N, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left(\varphi_i^{\sigma_j}(x_j) \right)_{1 \leq i, j \leq N},$$

où $(\varphi_1, \dots, \varphi_N) \in H^1(\mathbb{R}^3 \times \{\pm\}, \mathbb{C})^N = H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)^N$ forme un système orthonormé de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ et l'on a noté $\varphi = \begin{bmatrix} \varphi_i^+ \\ \varphi_i^- \end{bmatrix}$ ¹⁴. Les fonctions φ_i sont appelées *orbitales*. Les déterminants de Slater sont les fonctions d'onde anti-symétriques à N corps les plus simples que l'on puisse imaginer puisque les particules ne sont corrélées qu'à travers le principe de Pauli. En faisant cette approximation, on a considérablement réduit la dimension du problème puisqu'on ne cherche plus une fonction d'onde à N corps vivant dans $L^2(\mathbb{R}^{3N}, \mathbb{C}^{2N})$, mais N orbitales vivant dans $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$. Cependant, on obtient une fonctionnelle d'énergie

13. Les deux méthodes d'approximation les plus courantes sont la *théorie de la fonctionnelle de densité* et les approximations de type Hartree-Fock. Contrairement à la première, la deuxième méthode est purement variationnelle et produit ainsi un majorant de l'énergie du problème à N corps et non pas juste une approximation. La différence (non négative) entre la valeur minimale de l'énergie de Hartree-Fock et la valeur minimale de l'énergie donnée par H_V^N est appelée *énergie de corrélation*. On renvoie le lectorat intéressé par la théorie de la fonctionnelle de densité à [CLM06; LLY19; LLS22].

14. On rappelle que $L^2(\mathbb{R}^3 \times \{\pm\}, \mathbb{C}) \simeq L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$.

qui est non linéaire en $\varphi_1, \dots, \varphi_N$, l'ensemble des déterminants de Slater n'étant pas un sous-espace vectoriel de $\bigwedge_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$. L'énergie de Hartree-Fock est donc égale à

$$\begin{aligned} E_{N,V}^{\text{HF}}(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N) &= \left\langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N, H_V^N \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \varphi_i|^2 \right) + e \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} V \rho_\Phi \\ &\quad + \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Phi(x) \rho_\Phi(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\gamma_\Phi(x,y)|^2}{|x-y|} dx dy, \end{aligned}$$

où γ_Φ et ρ_Φ sont respectivement la *matrice de densité à un corps* et la *densité de particule* associées à l'état $\Phi = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N$. Ces objet prennent la forme suivante:

$$\gamma_\Phi(x, y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \varphi_i^*(y), \quad \rho_\Phi(x) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(x)|^2 = \text{Tr}_{\mathbb{C}^2} \gamma_\Phi(x, x),$$

où γ_Φ a été définie par son noyau intégral. La fonctionnelle $E_{N,V}^{\text{HF}}$ possède une propriété importante d'invariance par rotation, c'est-à-dire $E_{N,V}^{\text{HF}}(U\Phi) = E_{N,V}^{\text{HF}}(\Phi)$ pour toute matrice $U \in U(N)$ ¹⁵. Cela signifie que l'énergie n'est pas vraiment une fonction des N orbitales φ_i , mais plutôt du sous-espace vectoriel de dimension N qu'elles engendrent¹⁶. Pour cette raison, on réécrit l'énergie de la manière suivante:

$$\begin{aligned} E_{N,V}^{\text{HF}}(\gamma_\Phi) &= \frac{1}{2m} \text{Tr}(-\Delta \gamma_\Phi) + e \int_{\mathbb{R}^3} V \rho_\Phi \\ &\quad + \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Phi(x) \rho_\Phi(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\gamma_\Phi(x,y)|^2}{|x-y|} dx dy, \end{aligned} \quad (1.8)$$

où $\text{Tr}(-\Delta \gamma_\Phi)$ est la trace de l'opérateur $-\Delta \gamma_\Phi$ de rang fini, et l'on a maintenant une fonctionnelle qui est une fonction du projecteur orthogonal sur le sous-espace engendré par les orbitales qui n'est autre que γ_Φ . Le premier terme dans (1.8) s'interprète comme l'*énergie cinétique* du système. Les deux suivants sont respectivement l'*énergie potentielle* et le *terme direct*. Ils correspondent à des énergies d'interaction classiques entre distributions de charges. Le dernier terme, appelé *terme d'échange*, est quant à lui d'origine exclusivement quantique. Il sert notamment à corriger l'erreur de l'auto-interaction des électrons entre eux décrite par le terme direct.

Les équations d'Euler-Lagrange associées forment un système de N équations aux dérivées partielles non linéaires couplées,

$$D_\Phi^{\text{HF}} \varphi_i = \lambda_i \varphi_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.9)$$

où D_Φ^{HF} est l'*opérateur de champ moyen* (de Hartree-Fock) perçu par chacun des N électrons,

$$D_\Phi^{\text{HF}} = -\frac{\Delta}{2} + eV + e^2 \rho_\Phi * \frac{1}{|\cdot|} - e^2 \frac{\gamma_\Phi(x,y)}{|x-y|}.$$

15. $U(N)$ est l'ensemble des matrices unitaires de taille N , c'est-à-dire qu'elles vérifient $UU^* = U^*U = I_N$.

16. En particulier, cela implique l'inconvénient que le minimum de l'énergie (s'il existe) ne peut pas être unique.

Ceci signifie plus précisément que

$$\left(D_{\Phi}^{\text{HF}}\psi\right)(x) = -\frac{\Delta\psi(x)}{2} + eV(x)\psi(x) + e^2\left(\rho_{\Phi} * \frac{1}{|\cdot|}\right)(x)\psi(x) - e^2\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\gamma_{\Phi}(x,y)}{|x-y|}\psi(y)dy,$$

pour tout $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$. L'existence de solutions pour (1.9) dans le cas $Z > N - 1$ a été montrée d'abord par Lieb et Simon [LS77] et ensuite par Lions [Lio87] à l'aide d'une méthode différente.

1.2.2 Le modèle de Dirac-Fock

Les équations de Dirac-Fock relativistes ont été introduites par Swirles [Swi35]. Elles ont la même forme que les équations de Hartree-Fock (1.9) avec $-\Delta/(2m)$ remplacé par l'opérateur de Dirac D_m^0 . Bien évidemment, ces opérateurs agissent sur des fonctions à valeurs dans \mathbb{C}^4 à la place de \mathbb{C}^2 . On remarque pourtant qu'en remplaçant $-\Delta/(2m)$ par l'opérateur de Dirac D_m^0 dans la formule du hamiltonien à N corps (1.7) on obtient un opérateur dont le spectre coïncide avec \mathbb{R} si $N \geq 2$. De plus, on ne sait pas s'il existe des valeurs propres plongées dans le spectre essentiel. Dans tous les cas, le problème relativiste à N corps est donc mal posé, ce qui en restreint l'interprétation physique par rapport à son homologue non relativiste. Malgré cela, les équations de Dirac-Fock ont été largement utilisées en chimie quantique notamment pour étudier les molécules impliquant des atomes lourds, en obtenant des résultats plutôt précis lorsque les corrélations entre électrons sont négligeables.

En présence de N électrons, les équations de Dirac-Fock prennent la forme suivante:

$$D_{\Phi}^{\text{DF}}\varphi_i = \epsilon_i\varphi_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.10)$$

où $\Phi = (\varphi_1, \dots, \varphi_N) \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^N$ est un système orthonormé de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ et D_{Φ}^{DF} est l'opérateur de champ moyen (de Dirac-Fock),

$$D_{\Phi}^{\text{DF}} = D_m^0 + eV + e^2\rho_{\Phi} * \frac{1}{|\cdot|} - e^2\frac{\gamma_{\Phi}(x,y)}{|x-y|},$$

avec $\rho_{\Phi}(x) = \text{Tr}_{\mathbb{C}^4}(\gamma_{\Phi}(x,x)) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(x)|^2$ dans ce cadre. On remarque qu'ici $\gamma_{\Phi}(x,y)$ est une matrice complexe 4×4 et que l'opérateur associé n'est autre que le projecteur orthogonal dans le sous-espace vectoriel engendré par $\varphi_1, \dots, \varphi_N$. Comme dans le modèle de Hartree-Fock, ces équations sont les équations d'Euler-Lagrange associées à l'énergie donnée par la fonctionnelle de Dirac-Fock suivante¹⁷:

$$\begin{aligned} E_{N,V}^{\text{DF}}(\Phi) &= \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i, D_m^0 \varphi_i \rangle_{L^2} + e \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i, V \varphi_i \rangle_{L^2} \\ &\quad + \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\Phi}(x)\rho_{\Phi}(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\text{Tr}(\gamma_{\Phi}(x,y)\gamma_{\Phi}(y,x))}{|x-y|} dx dy, \end{aligned}$$

agissant sur $\Phi = (\varphi_1, \dots, \varphi_N) \in H^{1/2}(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)^N$ système orthonormé de $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. Trouver les solutions de (1.10) se réduit donc à trouver les points critiques de l'énergie $E_{N,V}^{\text{DF}}$ dans un espace de fonctions appropriées. Une fois de plus, ce problème variationnel est rendu très difficile par le spectre non borné de l'opérateur de Dirac libre ainsi que

17. Comme c'est le cas dans le modèle de Hartree-Fock, la fonctionnelle de Dirac-Fock est invariante par rotation et peut donc être réécrite comme fonction du projecteur γ_{Φ} .

par le manque de compacité du problème posé en \mathbb{R}^3 et par la condition d'orthogonalité des orbitales qui empêche de travailler dans l'espace entier. Des méthodes différentes des procédures de minimisation classiques ont été proposées dans [ES99; Pat00]. Pour les équations de Dirac-Fock, il est naturel de s'intéresser ensuite à la limite non relativiste. Dans cette limite, on retrouve les équations de Hartree-Fock (1.9) pour les deux composantes supérieures des φ_i (on rappelle que $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ sont fonctions à valeurs dans \mathbb{C}^4), tandis que les deux composantes inférieures convergent à zéro. La preuve rigoureuse de ce résultat se trouve dans [ES01].

1.2.3 L'approximation de champ moyen en électrodynamique quantique

Dans cette sous-section, on présente deux modèles principaux issus de l'électrodynamique quantique où le spectre négatif de l'opérateur de Dirac est interprété comme la mer de Dirac, considérée comme un objet physique qui peut réagir à des stimulations externes. En faisant cela, la principale conséquence surprenante est que la fonctionnelle d'énergie devient bornée par dessous, résolvant les problèmes principaux du modèle introduit dans la sous-section précédente. Par contre, le prix à payer dans ce nouveau cadre est qu'il faut s'occuper d'un nombre infini de particules (beaucoup d'entre elles étant virtuelles), à la place du nombre fini d'électrons réels des modèles HF et DF, ce qui pose un certain nombre d'autres problèmes mathématiques.

Mathématiquement, l'idée de Dirac est interprétée de la manière suivante: les états des électrons libres réels doivent forcément appartenir au sous-espace spectral positif de l'opérateur de Dirac libre, tandis que le vide est décrit par le projecteur spectral négatif de rang infini,

$$P_m^0 = \chi_{(-\infty, 0]}(D_m^0).$$

Comme on a vu dans les sous-sections précédentes, dans les théories de Hartree-Fock et de Dirac-Fock, la matrice de densité γ_Φ de l'état à N électrons $\Phi = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_N$ est précisément le projecteur orthogonal dans le sous-espace engendré par $\varphi_1, \dots, \varphi_N$. Donc, en associant le vide de Dirac au projecteur P_m^0 , on décrit formellement le vide comme un déterminant de Slater infini

$$\Omega^0 = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_i \wedge \dots,$$

où $(\varphi_i)_{i \geq 1}$ est une base orthonormée du sous-espace spectral négatif de D_m^0 .

En électrodynamique quantique, le hamiltonien formel décrivant une structure électronique en présence d'un potentiel électromagnétique (classique) extérieur $\mathbf{A}_{\text{ext}} = (V_{\text{ext}}, A_{\text{ext}})$ peut s'écrire dans la jauge de Coulomb de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}^{\mathbf{A}_{\text{ext}}} = & \int \Psi^*(x) [\boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla - e\mathbb{A}(x) - eA_{\text{ext}}(x)) + m\beta] \Psi(x) dx \\ & + e \int V_{\text{ext}}(x) \rho(x) dx + \frac{e^2}{2} \int \int \frac{\rho(x) \rho(y)}{|x-y|} dx dy + \mathbb{H}_{\text{ph}}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Dans cette formule, $\Psi(x)$ est l'opérateur champ en seconde quantification qui représente l'annihilation d'un électron en x et \mathbb{H}_{ph} décrit l'énergie cinétique des photons,

$$\mathbb{H}_{\text{ph}} = \frac{1}{8\pi} \int |\text{curl} \mathbb{A}(x)|^2 dx,$$

où $\mathbb{A}(x)$ est l'opérateur de potentiel vecteur pour les photons. L'opérateur densité $\rho(x)$

est défini par

$$\rho(x) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^4 [\Psi_{\sigma}^*(x), \Psi_{\sigma}(x)]. \quad (1.12)$$

On renvoie le lectorat aux références [Hei34; HE36; Ser36; Sch48; Hai+07; Lew11a] pour plus de détails sur le hamiltonien \mathbb{H}^{Aext} .

Le hamiltonien \mathbb{H}^{Aext} agit sur l'espace de Fock $\mathcal{F} = \mathcal{F}_e \otimes \mathcal{F}_{\text{ph}}$ où \mathcal{F}_e est l'espace de Fock fermionique pour les électrons et \mathcal{F}_{ph} est l'espace de Fock bosonique pour les photons. Dans ce cadre, l'approximation principale afin de dériver des modèles de type Hartree-Fock pour la description d'électrons relativistes consiste en restreindre le hamiltonien aux états de la forme suivante:

$$\Omega = \Omega_{\text{HF}} \otimes \Omega_{\text{coh}}, \quad (1.13)$$

où Ω_{HF} est l'état de Hartree-Fock électronique caractérisé par sa matrice de densité à un corps,

$$\gamma(x, y) = \langle \Psi^*(x) \Psi(y) \rangle_{\Omega_{\text{HF}}},$$

et Ω_{coh} est l'état cohérent (voir [Lew11b, Example 4]) caractérisé par son potentiel vecteur classique,

$$A(x) = \langle \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega_{\text{coh}}}.$$

En pratique, tout cela revient à représenter les électrons par un opérateur γ comme dans la théorie HF ordinaire, alors que les photons sont décrit par un potentiel vecteur classique A , qui n'est autre qu'un champ vectoriel classique. La différence principale avec les modèles précédents est que l'opérateur γ prend en compte non seulement les électrons réels, mais aussi ceux virtuels qui représentent le vide. Il ne s'agit plus d'un projecteur orthogonal de rang fini, mais plutôt de rang infini, ce qui cause l'apparition de divergences dans le calcul de l'énergie. En particulier, cette énergie est formellement dérivée en calculant l'espérance du hamiltonien \mathbb{H}^{Aext} sur des états de la forme (1.13). À une constante près (qui est bien définie dans une boîte de taille fixée et diverge dans la limite de volume infini), elle est égale à

$$\begin{aligned} E_{\text{Aext}}^{\text{HF-QED}}(\gamma, A) &= \text{Tr} \left(D_m^{e(V_{\text{ext}}, A+A_{\text{ext}})} \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) \right) + \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\gamma-1/2}(x) \rho_{\gamma-1/2}(y)}{|x-y|} dx dy \\ &\quad - \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|(\gamma - 1/2)(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |\text{curl} A(x)|^2 dx, \end{aligned} \quad (1.14)$$

où la fonction $(\gamma - 1/2)(x, y)$ représente le noyau (formel) de l'opérateur $\gamma - 1/2$ et $\rho_{\gamma-1/2}$ est formellement défini comme étant la diagonale du noyau ci-dessus,

$$\rho_{\gamma-1/2}(x) = (\gamma - 1/2)(x, x).$$

On remarque tout de suite que cette formule est très similaire à la fonctionnelle d'énergie de Hartree-Fock classique (1.8). L'énergie cinétique est maintenant donnée par $\text{Tr}(D_m^0(\gamma - 1/2))$ qui revient à remplacer l'opérateur classique $-\Delta/(2m)$ par son correspondant relativiste D_m^0 . On retrouve aussi le terme électrostatique direct et le terme électrostatique d'échange respectivement dans la première et dans la deuxième ligne¹⁸. La différence principale est que la fonctionnelle d'énergie n'est pas écrite directement en terme de la matrice de densité γ , mais plutôt en terme de la différence $\gamma - 1/2$. Cela est

18. Dans la théorie de la fonctionnelle de densité relativiste [ED87; Sch02], le terme d'échange est approximé par une fonction de $\rho_{\gamma-1/2}$ et de ses dérivées.

une conséquence très connue de la propriété d'invariance par conjugaison de charge de la QED. En effet, le hamiltonien $\mathbb{H}^{A_{\text{ext}}} = \mathbb{H}^{(V_{\text{ext}}, A_{\text{ext}})}$ vérifie formellement la relation suivante:

$$C\mathbb{H}^{(V_{\text{ext}}, A_{\text{ext}})}C^{-1} = \mathbb{H}^{(-V_{\text{ext}}, -A_{\text{ext}})},$$

où C est l'opérateur de conjugaison de charge agissant sur l'espace de Fock. Pour cette raison, l'opérateur de densité est défini à l'aide d'un commutateur par (1.12) afin d'avoir

$$C\rho(x)C^{-1} = -\rho(x).$$

Cette sorte de renormalisation indépendante de toute référence est due à Heisenberg [Hei34] (voir aussi [Pau41, Equation (96)], [Sch48, Equation (1.14)] et [Dys49, Equation (38)]). On insiste donc sur le fait que (1.11) n'implique aucune notion d'ordre normal ni de distinction entre électrons et positrons, qui devrait plutôt être une conséquence de la théorie.

La fonctionnelle d'énergie (1.14) est totalement mal définie à cause de plusieurs divergences. Puisque l'opérateur D_m^0 n'est pas borné et que $\gamma - 1/2$ a rang infini quand γ est un projecteur, l'énergie cinétique n'est pas bien définie. De plus, comme $\gamma - 1/2$ n'est pas un opérateur compact, son noyau et par conséquent la densité $\rho_{\gamma-1/2}$ ne sont pas définis non plus. Des divergences similaires apparaissent en QED, où des techniques de régularisation ont été développées afin de contourner la difficulté. Ces techniques reviennent principalement à introduire un *cut-off* ultraviolet dans le modèle. On verra dans la suite de cette sous-section comment adapter deux de ces techniques à notre cadre afin de donner un sens à la fonctionnelle (1.14).

On insiste sur le fait que notre objectif n'est pas d'obtenir tous les effets de la QED avec précision, mais plutôt de montrer comment l'introduction du vide auto-cohérent modifie radicalement les propriétés générales du modèle, ce qui conduit à une théorie variationnelle bien définie. Le fait que les états optimaux soient trouvés par un principe de minimisation est important à des fins de calcul et est essentiel pour justifier la théorie de la fonctionnelle de la densité relativiste [ED87; Sch02].

Le modèle purement électrostatique

Dans cette sous-section, non seulement on considère une approximation de champ moyen pour l'étude du hamiltonien de la QED, mais on ajoute aussi une autre approximation en négligeant les photons et supposant qu'il n'y ait pas de champs magnétiques externes. Ceci est bien évidemment une approximation très grossière, car cela empêche de décrire des effets physiques importants qui se produisent dans la théorie de la QED, tels que l'auto-énergie des électrons, la plus grande contribution au décalage de Lamb. Cependant, il s'agit d'une limitation technique, même si formellement on devrait pouvoir inclure les photons dans le modèle de la même manière, tout en gardant l'approximation de champ moyen.

Dans le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock, l'introduction du vide dans le modèle permet de traiter les énergies négatives du spectre de l'opérateur de Dirac et d'obtenir un état fondamental bien défini. Ceci avait été prédit par Chaix et Iracane [CI89] en 1989 (voir aussi [CIL89] et [Cha91]). On renvoie le lectorat intéressé à [Hai+07] pour une revue orientée physique et à [HLS07; ELS08] pour des références orientées mathématique.

Introduction. Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock ne prend en compte que les aspects cinétiques et électrostatiques. Le potentiel vecteur externe A_{ext} et le potentiel vecteur A

des photons sont fixés à 0. Quant au potentiel électrostatique externe V_{ext} , il est induit par une densité de charge externe ν selon la formule de Coulomb

$$V_{\text{ext}} = -e \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(y)}{|x-y|} dy.$$

Par conséquent, l'énergie formelle (1.14) pour l'opérateur de densité à un corps γ se réduit à l'expression suivante:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\nu^{\text{HF-QED}}(\gamma) &= \text{Tr} \left(D_m^0 \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) \right) - \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\gamma-1/2}(x) \nu(y)}{|x-y|} dx dy \\ &+ \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\gamma-1/2}(x) \rho_{\gamma-1/2}(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|(\gamma-1/2)(x,y)|^2}{|x-y|} dx dy, \end{aligned} \quad (1.15)$$

où l'on a remplacé la charge élémentaire e par la constante de structure fine $\alpha = e^2$. Le lectorat peut reconnaître la fonctionnelle d'énergie de Hartree-Fock ayant la matrice de densité renormalisée $\gamma - 1/2$ comme argument à la place de la matrice de densité habituelle γ .

Les points critiques de l'énergie $\mathcal{E}_\nu^{\text{HF-QED}}$ sont solutions de l'équation auto-cohérente suivante:

$$\left[D_\gamma^{\text{HF-QED}}, \gamma \right] = 0,$$

où l'opérateur de champ moyen $D_\gamma^{\text{HF-QED}}$ est donné par

$$D_\gamma^{\text{HF-QED}} = D_m^0 + \alpha(\rho_\gamma - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{|\gamma(x,y)|}{|x-y|}.$$

Malheureusement, la fonctionnelle d'énergie $\mathcal{E}_\nu^{\text{HF-QED}}$ n'est pas bien définie dans (1.15). En effet, si γ est un projecteur orthogonal (comme c'est le cas pour les états de Hartree-Fock), alors $\gamma - 1/2$ n'est jamais un opérateur compact dans un espace de dimension infinie, ce qui implique qu'aucun des termes apparaissant dans (1.15) n'a de signification mathématique claire.

Dans [HLS07], on propose de surmonter cette difficulté de la manière suivante : on restreint l'ensemble du système à une boîte de taille L avec des conditions périodiques aux limites et un *cut-off* ultraviolet dans le domaine de Fourier. Toutes les formules ci-dessus sont alors parfaitement définies, car on se trouve dans un cadre de dimension finie. En particulier, on peut maintenant définir les minimiseurs de la fonctionnelle d'énergie HF-QED avec ou sans potentiel électrique externe V_{ext} , avec ou sans contrainte de charge. Ensuite, on étudie la limite du minimiseur dans la classe considérée lorsque la taille L de la boîte augmente, tout en gardant le *cut-off* Λ fixe. La limite, si elle existe, est le minimiseur formel de l'énergie non bornée $\mathcal{E}_\nu^{\text{HF-QED}}$. En fait, on utilise cette méthode pour définir le vide libre, c'est-à-dire le minimiseur global de $\mathcal{E}_0^{\text{HF-QED}}$ lorsque $\nu = 0$. Une fois le vide libre défini, on soustrait formellement son énergie (infinie) à la formule (1.15) en obtenant une fonctionnelle d'énergie bien définie et bornée par dessous, appelée *énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock*, qui est liée au travail de Chaix et Iracane [CI89].

Définition du vide libre. Avant de restreindre notre système à une boîte de taille L et d'en étudier la fonctionnelle d'énergie associée et la limite thermodynamique, on introduit l'énergie par unité de volume dans l'espace entier, mais dans le cadre particulier d'états invariants par translations et en l'absence de champ électrique externe. On introduit

d'abord un *cut-off* ultraviolet en définissant l'ensemble suivant:

$$\mathfrak{H}_\Lambda = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4) \mid \text{supp } \widehat{\psi} \subseteq B(0, \Lambda) \right\}.$$

Ensuite, on veut définir l'énergie par unité de volume d'un opérateur γ invariant par translations, agissant sur \mathfrak{H}_Λ et tel que

$$-\frac{I_\Lambda}{2} \leq \gamma \leq \frac{I_\Lambda}{2},$$

I_Λ étant l'identité sur \mathfrak{H}_Λ . Un tel opérateur agit comme un opérateur de multiplication dans l'espace de Fourier et peut donc s'écrire comme $\gamma = f(-i\nabla)$, avec f appartenant à l'ensemble suivant:

$$\mathcal{A}_\Lambda = \left\{ f \in L^\infty(B(0, \Lambda), \mathcal{S}_4(\mathbb{C})) \mid -\frac{I_{\mathbb{C}^4}}{2} \leq f \leq \frac{I_{\mathbb{C}^4}}{2} \right\}.$$

Ici, $\mathcal{S}_4(\mathbb{C})$ est l'ensemble des matrices complexes auto-adjointes 4×4 . L'énergie par unité de volume d'un tel opérateur $\gamma = f(-i\nabla)$ peut donc s'écrire en fonction de $f \in \mathcal{A}_\Lambda$ comme suit (voir [HLS07, Section 2.2] pour la dérivation):

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(f) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{B(0, \Lambda)} \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} [D_m^0(p) f(p)] dp \\ &\quad - \frac{\alpha}{(2\pi)^5} \int_{B(0, \Lambda)} \int_{B(0, \Lambda)} \frac{\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} [f(p) f(q)]}{|p - q|^2} dp dq. \end{aligned}$$

Le théorème suivant fournit la définition du vide libre:

Théorème 1.3 ([HLS07, Theorem 2.2]). *Soient $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$ et $m > 0$. Alors il existe un unique minimiseur \bar{f} de \mathcal{T} sur \mathcal{A}_Λ . La matrice de densité renormalisée associée $\gamma^0 = \bar{f}(-i\nabla)$ est un opérateur invariant par translations qui vérifie les équations auto-cohérentes suivantes:*

$$\begin{cases} \gamma^0 = -\frac{\text{sign}(\mathcal{D}_m^0)}{2}, \\ \mathcal{D}_m^0 = D_m^0 - \alpha \frac{\gamma^0(x, y)}{|x - y|}, \end{cases} \quad (1.16)$$

ou, de façon équivalente,

$$\mathcal{P}_m^0 = \gamma^0 + \frac{I_\Lambda}{2} = \chi_{(-\infty, 0]}(\mathcal{D}_m^0). \quad (1.17)$$

On remarque que l'Éq. (1.17) correspond à l'image habituelle de Dirac selon laquelle la matrice de densité du vide libre doit être le projecteur associé à la partie négative du spectre d'un opérateur de Dirac invariant par translations. On souligne que dans de nombreux travaux, le vide libre est supposé être représenté par le projecteur de l'opérateur de Dirac libre,

$$P_m^0 = \chi_{(-\infty, 0]}(D_m^0),$$

comme l'a suggéré Dirac lui-même [Dir34a; Dir34b]. Le vrai vide de Hartree-Fock \mathcal{P}_m^0 obtenu par le théorème précédent est différent de P_m^0 sauf lorsque $\alpha = 0$. L'interprétation est que, contrairement à P_m^0 , les interactions auto-cohérentes entre les particules virtuelles du vide doivent être prises en compte via le terme $\alpha \gamma^0(x, y) / |x - y|$ dans (1.16).

La limite thermodynamique. On considère maintenant une boîte de taille L , $C_L = [-L/2, L/2]^3$, et on restreint l'analyse du système à cette boîte avec conditions périodiques aux limites et *cut-off* UV Λ . Tout cela équivaut à supposer que les matrices de densité γ agissent sur l'espace de dimension finie

$$\mathfrak{H}_{L,\Lambda} = \left\{ \sum_{\substack{k \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}^3 \\ |k| \leq \Lambda}} a_k e^{i\langle k, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^3}} \mid a_k \in \mathbb{C}^4 \right\}.$$

Dans ce cadre périodique, la fonctionnelle d'énergie HF-QED (sans potentiel électrique externe ν) est alors définie comme suit:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0^L(\gamma_L) = \operatorname{Tr} \left(D_m^0 \gamma_L \right) + \frac{\alpha}{2} \int_{C_L} \int_{C_L} \rho_{\gamma_L}(x) G_L(x-y) \rho_{\gamma_L}(y) dx dy \\ - \frac{\alpha}{2} \int_{C_L} \int_{C_L} |\gamma_L(x,y)|^2 G_L(x-y) dx dy, \end{aligned} \quad (1.18)$$

où G_L est le noyau de Coulomb périodique donné par

$$G_L(z) = \frac{4\pi}{L^3} \sum_{k \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \frac{1}{|k|^2} e^{i\langle k, z \rangle_{\mathbb{R}^3}} + K_L,$$

avec la constante K_L fixée afin que G_L soit positif. La fonctionnelle (1.18) est bien définie pour toute matrice de densité renormalisée γ_L agissant sur $\mathfrak{H}_{L,\Lambda}$ et telle que $\gamma_L + I_{L,\Lambda}/2$ soit un projecteur orthogonal, $I_{L,\Lambda}$ étant l'identité sur $\mathfrak{H}_{L,\Lambda}$. D'ailleurs, en suivant la méthode proposée par Lieb [Lie81], on peut étudier la fonctionnelle (1.18) agissant sur l'espace

$$\mathcal{G}_{L,\Lambda} = \left\{ \gamma_L \in \mathcal{L}(\mathfrak{H}_{L,\Lambda}) \mid \gamma_L^* = \gamma_L, -\frac{I_{L,\Lambda}}{2} \leq \gamma_L \leq \frac{I_{L,\Lambda}}{2} \right\}.$$

Cette méthode est standard dans la théorie de Hartree-Fock: cela permet de simplifier la construction des minimiseurs et il s'avère que ceux-ci résolvent encore le problème initial.

On peut enfin énoncer le théorème suivant concernant la limite thermodynamique du modèle considéré:

Théorème 1.4 ([HLS07, Theorem 2.7]). *Soient $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$ et $m > 0$. Alors, pour L suffisamment grand, il existe un unique minimiseur $\gamma_L^0 = \mathcal{P}_{m,L}^0 - I_{L,\Lambda}/2$ de \mathcal{E}_0^L sur $\mathcal{G}_{L,\Lambda}$, où $\mathcal{P}_{m,L}^0$ est un projecteur orthogonal. Ce minimiseur est invariant par translations, $\gamma_L^0 = f_L^0(-i\nabla)$. De plus, on a que*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{E}_0^L(\gamma_L^0)}{L^3} = \min \{ \mathcal{T}(f) \mid f \in \mathcal{A}_\Lambda \},$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left\| \gamma_L^0 - \gamma^0 \right\|_{\mathfrak{S}_\infty} = 0$$

et

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left\| \mathcal{P}_{m,L}^0 - \mathcal{P}_m^0 \right\|_{\mathfrak{S}_\infty} = 0.$$

En particulier, ce théorème suggère que l'opérateur γ^0 , qui est la matrice de densité du vide de Hartree-Fock dans l'espace entier avec un *cut-off* Λ (définie rigoureusement dans

le paragraphe précédent), est formellement un minimiseur de l'énergie $\mathcal{E}_0^{\text{HF-QED}}$ malgré le fait que son énergie soit égale à $-\infty$.

Le modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock. Pour l'instant, on a défini à l'aide d'une limite thermodynamique le vide libre qui est l'unique minimiseur de $\mathcal{E}_0^{\text{HF-QED}}$ bien que son énergie soit égale à $-\infty$. Le vide libre correspond à la mer de Dirac d'un opérateur de Dirac effectif invariant par translations et auto-cohérent. Maintenant, en suivant l'argument de Chaix et Iracane [CI89], on utilise ce vide comme référence et on soustrait son énergie infinie à l'énergie HF-QED d'origine, afin d'obtenir une fonctionnelle bornée par dessous,

$$\mathcal{E}_\nu^{\text{BDF}} \left(P - \mathcal{P}_m^0 \right) = \mathcal{E}_\nu^{\text{HF-QED}} \left(P - \frac{I_\Lambda}{2} \right) - \mathcal{E}_0^{\text{HF-QED}} \left(\mathcal{P}_m^0 - \frac{I_\Lambda}{2} \right).$$

Bien évidemment, le calcul formel ci-dessus peut à nouveau être justifié par une limite thermodynamique. On renvoie le lectorat intéressé aux références [HLS05a; HLS05b; HLS07] pour une présentation détaillée du modèle.

Finalement, l'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock (BDF) prend la forme suivante:

$$\begin{aligned} E_\nu^{\text{BDF}}(Q) &= \text{Tr}_{\mathcal{P}_m^0} \left(\mathcal{D}_m^0 Q \right) - \alpha \mathcal{D}(\rho_Q, \nu) \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\rho_Q, \rho_Q) - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy, \end{aligned} \quad (1.19)$$

où

$$Q \in \mathcal{Q}_\Lambda = \left\{ Q \in \mathfrak{S}_1^{\mathcal{P}_m^0}(\mathfrak{H}_\Lambda) \mid -\mathcal{P}_m^0 \leq Q \leq 1 - \mathcal{P}_m^0, \rho_Q \in \mathcal{C} \right\}$$

et

$$\mathcal{C} = \left\{ \rho \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^3) \mid \widehat{\rho} \in L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^3), \mathcal{D}(\rho, \rho) < \infty \right\} \quad (1.20)$$

est l'espace de Coulomb muni du produit scalaire suivant:

$$\mathcal{D}(\rho_1, \rho_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\overline{\widehat{\rho}_1(k)} \widehat{\rho}_2(k)}{|k|^2} dk. \quad (1.21)$$

L'espace $\mathfrak{S}_1^{\mathcal{P}_m^0}(\mathfrak{H}_\Lambda)$ est introduit dans [HLS05a, Sec. 2.1]. Il contient tous les opérateurs de Hilbert-Schmidt $Q \in \mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)$ qui sont tels que $Q^{++} = (1 - \mathcal{P}_m^0) Q (1 - \mathcal{P}_m^0)$ et $Q^{--} = \mathcal{P}_m^0 Q \mathcal{P}_m^0$ sont à trace ($\in \mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_\Lambda)$). La \mathcal{P}_m^0 -trace de Q est alors définie par

$$\text{Tr}_{\mathcal{P}_m^0} Q = \text{Tr} \left(Q^{++} + Q^{--} \right).$$

De plus, $\rho_Q(x) = \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} Q(x, x)$ est la densité de charge associée à Q qui est bien définie dans l'espace de Fourier grâce au *cut-off* ultraviolet [HLS05a, Section 2.2],

$$\widehat{\rho}_Q(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\substack{|p+\frac{k}{2}| < \Lambda \\ |p-\frac{k}{2}| < \Lambda}} \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left(\widehat{Q} \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) \right) dp.$$

L'interprétation de (1.19) est que $E_\nu^{\text{BDF}}(\gamma - \gamma^0)$ est l'énergie de l'état HF γ mesurée relativement à l'énergie du vide libre γ^0 . L'énergie de BDF a été introduite pour la première fois par Chaix et Iracane [CI89], mais avec \mathcal{P}_m^0 et \mathcal{D}_m^0 remplacés par P_m^0 et D_m^0 . Cette fonctionnelle a été étudiée mathématiquement pour la première fois dans [Bac+99]. Chaix et Iracane obtiennent leur énergie en imposant dès le départ un ordre normal au

hamiltonien de la QED, en prenant comme définitions des positrons et des électrons celles données par la décomposition induite par P_m^0 . Si $\alpha = 0$, notre modèle est équivalent à celui de Chaix et Iracane, mais il ne l'est pas lorsque $\alpha \neq 0$. Il semble que l'ordre normal ne soit pleinement pertinent que pour la description des systèmes non interagissant.

L'énergie de Bogoliubov-Dirac-Fock est enfin bien définie et bornée par dessous.

Théorème 1.5 ([HLS07, Theorem 2.5]). *Soient $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$, $m > 0$ et $\nu \in \mathcal{C}$.*

(i) *On a que*

$$E_\nu^{\text{BDF}}(Q) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\nu, \nu) \geq 0, \quad Q \in \mathcal{Q}_\Lambda$$

et donc E_ν^{BDF} est bornée par dessous sur \mathcal{Q}_Λ .

(ii) *Si $\nu = 0$, alors E_0^{BDF} est non négative sur \mathcal{Q}_Λ , 0 étant son unique minimiseur.*

Après tous ces détails mathématiques, on est maintenant en mesure de minimiser l'énergie BDF. On peut soit chercher un minimiseur global qui sera interprété comme le vide polarisé en présence du potentiel externe engendré par la densité de charge ν , soit un minimiseur avec une contrainte de charge,

$$\text{Tr}_{\mathcal{P}_m^0} Q = N,$$

qui représente généralement l'état de N électrons couplés au vide polarisé auto-cohérent. Dans les deux cas, le minimiseur obtenu est à \mathcal{P}_m^0 -trace et non pas à trace sauf lorsque $\nu = 0$, ce qui est lié à la *renormalisation*. On traitera dans le prochain paragraphe l'existence du vide polarisé. On renvoie par contre le lectorat intéressé à l'existence d'atomes et molécules dans ce cadre aux références [Hai+07, Sec. VI] et [HLS09].

Le vide polarisé. Le vide polarisé est par définition l'état d'énergie QED minimale parmi les états de Hartree-Fock sans photons. C'est aussi l'état où l'énergie de BDF est la plus faible.

Théorème 1.6 ([HLS07, Theorem 2.6]). *Soient $0 \leq \alpha < 4/\pi$, $\Lambda > 0$, $m > 0$ et $\nu \in \mathcal{C}$. Alors E_ν^{BDF} possède un minimiseur \bar{Q} sur \mathcal{Q}_Λ tel que $\bar{\gamma} = \bar{Q} + \gamma^0$ vérifie le système d'équations auto-cohérentes suivant:*

$$\begin{cases} \bar{\gamma} = -\frac{\text{sign}(\bar{\mathcal{D}})}{2}, \\ \bar{\mathcal{D}} = D_m^0 + \alpha(\rho_{\bar{\gamma}} - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{\bar{\gamma}(x,y)}{|x-y|}, \end{cases}$$

ou, de façon équivalente,

$$\bar{\mathcal{P}} = \bar{\gamma} - \frac{I_\Lambda}{2} = \bar{Q} + \mathcal{P}_m^0 = \chi_{(-\infty, 0]}(\bar{\mathcal{D}}). \quad (1.22)$$

En plus, si α et ν vérifient

$$0 \leq \alpha \frac{\pi}{4} \left[1 - \alpha \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{\alpha/2}{1 - \alpha\pi/4}} + \pi^{1/6} 2^{11/6} \right) \|\nu\|_{\mathcal{C}} \right]^{-1} \leq 1,$$

alors ce minimiseur global \bar{Q} est unique et le vide polarisé associé est neutre,

$$\text{Tr}_{\mathcal{P}_m^0} \bar{Q} = 0.$$

On remarque que

$$\bar{D} = D_m^0 + eV + O(\alpha^2).$$

En général, il faut créer des paires électron-positron afin de déformer \mathcal{P}_m^0 en vide polarisé. Cependant, la deuxième partie de ce théorème montre que si le champ électrique externe est suffisamment faible, le vide polarisé reste neutre.

L'équation d'évolution de BDF. L'équation d'évolution associée à ce modèle peut être également utile, en particulier pour l'étude de la création spontanée de paires électron-positron, qui est généralement formulée en termes d'une théorie adiabatique pour l'équation d'évolution [RGA71; Nen80]. Elle a la forme suivante:

$$i \frac{d}{dt} P(t) = \left[D_{P(t)-\mathcal{P}_m^0}^{\text{BDF}}, P(t) \right], \quad (1.23)$$

où D_Q^{BDF} est l'opérateur de champ moyen (de Bogoliubov-Dirac-Fock) donné par

$$D_Q^{\text{BDF}} = D_m^0 + \alpha(\rho_Q - \nu) * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|}.$$

Si ce problème d'évolution est maintenant bien compris pour des potentiels électriques externes stationnaires [HLS05c] (sous certaines hypothèses sur la condition de Cauchy), le problème reste ouvert pour des potentiels dépendant du temps. On remarque que les équations du modèle BDF étaient déjà connues dans la littérature physique bien avant du papier de Chaix et Iracane [RGA71, Equation (4)].

La renormalisation de la charge. Comme déjà mentionné, le minimiseur de l'énergie BDF (sans ou avec contrainte de charge) est à \mathcal{P}_m^0 -trace et non pas à trace sauf lorsque $\nu = 0$, ce qui est lié à la renormalisation. Dans ce paragraphe, on se restreint au modèle BDF réduit, c'est-à-dire on considère la fonctionnelle d'énergie réduite E_ν^{rBDF} obtenue à partir de la fonctionnelle (1.19) en négligeant le terme d'échange.

Théorème 1.7 ([GLS09, Theorem 4]). *Soient $\alpha \geq 0$, $\Lambda > 0$ et $m > 0$. Soit $\nu \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}$ tel que*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nu = Z \in \mathbb{R}.$$

Si Q_q est un minimiseur de E_ν^{rBDF} dans un secteur de charge q , alors $\rho_Q \in L^1(\mathbb{R}^3)$ et

$$\int_{\mathbb{R}^3} (\nu - \rho_Q) = \frac{Z - q}{1 + \alpha B_\Lambda^0}, \quad (1.24)$$

où

$$B_\Lambda^0 = \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\Lambda}{\sqrt{1+\Lambda^2}}} \frac{z^2 - z^4/3}{1 - z^2} dz > 0. \quad (1.25)$$

Compte tenu de ce théorème, un minimiseur Q_q n'est jamais un opérateur à trace, au moins lorsque $q \neq Z$. En effet, l'intégrale de sa densité de charge serait autrement égale à

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{Q_q} = \text{Tr } Q_q = q,$$

ce qui contredirait le fait que B_Λ^0 dans (1.25) est un nombre positif. Le fait que les minimiseurs Q_q ne soient pas à trace engendre une difficulté dans leur interprétation

physique. Le potentiel électrostatique total V_{ph} , qui est induit par la densité de charge externe ν et par les électrons (couplés avec le vide polarisé) représentés par Q_q , est défini par la formule de Coulomb comme suit:

$$V_{\text{ph}}(x) = \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu(y) - \rho_{Q_q}(y)}{|x-y|} dy. \quad (1.26)$$

Lorsque $|x|$ est suffisamment grand, une approximation du potentiel V_{ph} est fournie par la formule

$$V_{\text{ph}}(x) \approx \frac{\alpha}{|x|} \int_{\mathbb{R}^3} (\nu - \rho_{Q_q}).$$

Compte tenu de (1.24), on trouve le comportement asymptotique suivant:

$$V_{\text{ph}}(x) \approx \frac{\alpha}{1 + \alpha B_{\Lambda}^0} \frac{Z - q}{|x|} \neq \alpha \frac{Z - q}{|x|}, \quad (1.27)$$

lorsque $|x| \rightarrow +\infty$. Alors que le minimiseur Q_q est censé représenter une structure électronique avec q électrons, le potentiel V_{ph} ne correspond pas à la formule de Coulomb pour un potentiel induit par une charge totale égale à $Z - q$. À ce stade, on pourrait penser qu'il suffit de prendre la limite ultraviolette $\Lambda \rightarrow +\infty$ pour résoudre ce problème, mais ce n'est pas malheureusement le cas. La constante B_{Λ}^0 est logarithmiquement divergente lorsque $\Lambda \rightarrow +\infty$. En effet, on peut vérifier que

$$B_{\Lambda}^0 = \frac{2}{3\pi} \log(\Lambda) - \frac{5}{9\pi} + \frac{2}{3\pi} \log(2) + O\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right).$$

Par conséquent, le potentiel V_{ph} s'annule dans la limite ultraviolette.

Cette divergence logarithmique apparaît également en électrodynamique quantique. Dans cet autre cadre, cette difficulté est résolue en introduisant une renormalisation de la charge. En gros, la renormalisation de la charge consiste à accepter l'idée que la constante de structure fine *bare* α dans le modèle n'est pas la constante de structure fine α_{ph} qui est observée expérimentalement. La constante de structure fine physique est définie selon la formule suivante:

$$\alpha_{\text{ph}} = \frac{\alpha}{1 + \alpha B_{\Lambda}^0},$$

de sorte que la formule (1.27) corresponde à la limite à l'infini d'un potentiel de Coulomb induit par une charge totale égale à $Z - q$. La modification de la définition de la constante de structure fine modifie à son tour la définition du potentiel V_{ph} , qui doit donc être égal à

$$V_{\text{ph}}(x) = \alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\text{ph}}(y)}{|x-y|} dy,$$

où ρ_{ph} désigne la densité de charge totale observée expérimentalement. Compte tenu de (1.26), il faut donc que la valeur de ρ_{ph} soit donnée par l'égalité suivante:

$$\alpha_{\text{ph}} \rho_{\text{ph}} = \alpha (\nu - \rho_{Q_q}).$$

Une question naturelle consiste à s'interroger sur la pertinence physique des quantités α_{ph} et ρ_{ph} . Dans le cadre de l'électrodynamique quantique, on peut développer ρ_{ph} en série de puissances de α_{ph} (lorsque $\alpha_{\text{ph}} \rightarrow 0$) et vérifier que les calculs résultants sont en accord avec les mesures physiques. Dans le cas du modèle réduit de Bogoliubov-Dirac-Fock, on peut se demander s'il est possible de calculer une expansion de ρ_{ph} lorsque $\alpha_{\text{ph}} \rightarrow 0$ et en

vérifier la consistance avec celle fournie par l'électrodynamique quantique. La réponse est positive et on renvoie le lectorat intéressé à [GLS11] pour une discussion plus détaillée du sujet.

Le modèle électromagnétique

La limitation principale du modèle de Bogoliubov-Dirac-Fock réside dans sa nature purement électrostatique qui par exemple empêche la description du rôle joué par les photons dans le phénomène de polarisation du vide. Dans cette sous-section, on veut donc présenter un modèle de type Hartree-Fock plus général qui prenne en compte certains contributions des photons ainsi que des champs magnétiques extérieurs. On renvoie le lectorat intéressé aux références [Gra+13; Lew12].

Dérivation formelle. Dans la sous-section précédente, on a vu que la dérivation du modèle BDF à partir de l'énergie (1.14) s'appuie sur l'omission de certains termes tout en introduisant une technique de régularisation appropriée. Cette régularisation repose sur l'introduction d'un *cut-off* ultraviolet dans l'espace de Fourier. Ce choix brise l'invariance de jauge magnétique correspondant au remplacement de A par $A + \nabla\varphi$, qui est très utilisée en QED afin d'enlever certaines divergences dans les calculs perturbatifs. En conséquence, un modèle prenant en compte les photons et les champs magnétiques extérieurs ne peut pas s'appuyer sur la même méthode de régularisation.

Afin de dériver un modèle alternatif, on peut réécrire le terme électrostatique direct comme indiqué ci-dessous:

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\gamma-1/2}(x) \rho_{\gamma-1/2}(y)}{|x-y|} dx dy \\ = e \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\gamma-1/2}(x) V_{\gamma-1/2}(x) dx - \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla V_{\gamma-1/2}(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

avec

$$V_{\gamma-1/2}(x) = e \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_{\gamma-1/2}(y)}{|x-y|} dy$$

étant le potentiel de Coulomb engendré par la densité de charge $\rho_{\gamma-1/2}$. Puisque $V_{\gamma-1/2}$ résout le problème d'optimisation suivant:

$$\begin{aligned} e \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\gamma-1/2}(x) V_{\gamma-1/2}(x) dx - \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla V_{\gamma-1/2}(x)|^2 dx \\ = \sup_V \left\{ e \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\gamma-1/2} V - \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla V|^2 \right\}, \end{aligned}$$

on peut réécrire l'énergie (1.14) comme

$$E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{QED}} = \sup_V \mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{QED}}(\gamma, \mathbf{A}),$$

où $\mathbf{A} = (V, A)$ et le lagrangien de Hartree-Fock formel $\mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{QED}}$ est donné par

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{QED}}(\gamma, \mathbf{A}) &= \text{Tr} \left(D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} (\gamma - 1/2) \right) - \frac{e^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|(\gamma - 1/2)(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy \\ &\quad + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\text{curl} A(x)|^2 - |\nabla V(x)|^2 \right) dx. \end{aligned}$$

De même que pour le modèle BDF, on peut ici aussi introduire un lagrangien réduit en négligeant le terme d'échange,

$$\mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}}(\gamma, \mathbf{A}) = \text{Tr} \left(D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} (\gamma - 1/2) \right) + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\text{curl} A(x)|^2 - |\nabla V(x)|^2 \right) dx.$$

Dans la suite de cette sous-section, on se limitera à l'étude du modèle réduit. À notre connaissance, l'analyse du modèle complet demeure un problème ouvert.

Le vide polarisé est construit en tant que minimiseur de l'énergie réduite formelle,

$$E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}}(\gamma, A) = \sup_V \mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}},$$

par rapport à la matrice de densité à un corps γ et au champ classique A dû aux photons. L'opérateur γ est à nouveau un projecteur orthogonal, tandis que le champ A est à divergence nulle en raison de la jauge de Coulomb. Le minimiseur (γ_*, A_*) (s'il existe) est solution des équations auto-cohérentes suivantes:

$$\begin{cases} \gamma_* = \chi_{(-\infty, 0]} \left(D_m^{e(\mathbf{A}_* + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right), \\ -\Delta A_* = 4\pi e j_{\gamma_* - 1/2}, \\ -\Delta V_* = 4\pi e \rho_{\gamma_* - 1/2}, \\ \text{div} A_* = \text{div} A_{\text{ext}} = 0, \end{cases} \quad (1.28)$$

où $\rho_{\gamma_* - 1/2}$ et $j_{\gamma_* - 1/2}$ sont respectivement la densité de charge et le courant de charge définies par

$$\rho_{\gamma_* - 1/2}(x) = \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left((\gamma_* - 1/2)(x, x) \right) \quad \text{and} \quad j_{\gamma_* - 1/2} = \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left(\boldsymbol{\alpha} (\gamma_* - 1/2)(x, x) \right).$$

Pour ce qui concerne la construction de structures électroniques à N électrons (c'est-à-dire avec N particules réelles), il faut ajouter la contrainte sur la charge de même que pour le modèle BDF:

$$\text{Tr}(\gamma - 1/2) = N.$$

Dans ce cas, les équations du minimiseur (γ_N, A_N) (s'il existe) deviennent

$$\begin{cases} \gamma_N = \chi_{(-\infty, \mu_N]} \left(D_m^{e(\mathbf{A}_N + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right), \\ -\Delta A_N = 4\pi e j_{\gamma_N - 1/2}, \\ -\Delta V_N = 4\pi e \rho_{\gamma_N - 1/2}, \\ \text{div} A_N = \text{div} A_{\text{ext}} = 0, \end{cases}$$

où μ_N est un multiplicateur de Lagrange représentant le *niveau de Fermi*¹⁹ de la structure

19. Le niveau de Fermi est une fonction de la température mais il peut être considéré, en première approximation, comme une constante décrivant le niveau de plus haute énergie occupé par les électrons du système à la température de 0K.

électronique ou également un potentiel chimique. La construction de structures électroniques ou positroniques dans le cadre de ce modèle demeure aussi un problème ouvert.

Au lieu d'optimiser le lagrangien $\mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}}(\gamma, \mathbf{A})$ d'abord par rapport à V et puis de trouver un minimiseur de la quantité résultante par rapport à γ et A , on peut raisonner autrement et minimiser d'abord par rapport à γ et puis chercher un point-selle par rapport à V et A . Pour l'instant, on garde toujours une discussion formelle, mais on verra que cette stratégie alternative est cohérente avec les équations (1.28) et simplifie le problème. En effet, dans ce cadre, le minimiseur du problème d'optimisation,

$$\inf_{\gamma} \mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}}, \quad (1.29)$$

est explicitement donné par

$$\gamma_{\mathbf{A}} = \chi_{(-\infty, 0]} \left(D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right),$$

et la valeur minimale correspondante est égale à

$$\inf_{\gamma} \mathcal{L}_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rQED}} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left| D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right| + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\text{curl} A|^2 - |\nabla V|^2 \right).$$

Afin de construire le vide polarisé, il ne reste qu'à résoudre un problème de min-max qui ne dépend que de V et A , c'est-à-dire

$$\min_A \max_V \left\{ -\frac{1}{2} \text{Tr} \left| D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right| + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\text{curl} A|^2 - |\nabla V|^2 \right) \right\}.$$

La méthode de régularisation de Pauli-Villars. La totalité des discussions précédentes étant purement formelle, on introduit maintenant une technique de régularisation issue de la QED afin de définir rigoureusement le modèle. La première étape est très similaire à ce que l'on a fait pour le modèle BDF. Pour $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{\text{ext}} = 0$, le projecteur spectral négatif P_m^0 de l'opérateur de Dirac libre résout formellement le problème (1.29). Cependant, la valeur minimale correspondante est égale à

$$\inf_{\gamma} \mathcal{L}_0^{\text{rQED}}(\gamma, 0) = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left| D_m^0 \right|,$$

qui est une quantité infinie. On commence par introduire une énergie relative selon la formule suivante:

$$E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rel}}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\left| D_m^0 \right| - \left| D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right| \right) + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\text{curl} A|^2 - |\nabla V|^2 \right),$$

pour que le vide libre ait formellement une énergie nulle. Formellement, en soustrayant une constante infinie, on ne change pas le problème variationnel, mais on peut espérer que $E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{rel}}(\mathbf{A})$ soit finie à condition que \mathbf{A} et \mathbf{A}_{ext} appartiennent à des espaces de fonctions appropriées. En fait, l'énergie demeure divergente dans le domaine des hautes fréquences. En particulier, l'opérateur $\left| D_m^0 \right| - \left| D_m^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right|$ n'est pas à trace dès que $\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}} \neq 0$ et donc sa trace n'est pas bien définie. Afin d'enlever ces divergences, il faut imposer un *cut-off* ultraviolet. Dans la littérature de la QED, plusieurs techniques ont été proposées. Dans ce modèle, on s'intéresse à la méthode de régularisation introduite par Pauli et Villars

en 1949 [PV49]. Dans notre cadre, cette technique consiste à introduire la fonctionnelle

$$E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\sum_{j=0}^2 c_j \left(|D_{m_j}^0| - |D_{m_j}^{e(\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{ext}})}| \right) \right) + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} (|\text{curl} \mathbf{A}|^2 - |\nabla V|^2). \quad (1.30)$$

Dans cette formule, l'indice $j = 0$ correspond au champ électron-positron classique. En particulier, $m_0 = m$ est la masse de l'électron. Les indices $j = 1$ et $j = 2$ décrivent deux champs associés à deux particules lourdes fictives. Leur présence permet d'enlever les divergences ultraviolettes linéaires. Pour cela, les coefficients c_j et les masses m_j doivent vérifier les conditions suivantes:

$$\sum_{j=0}^2 c_j = \sum_{j=0}^2 c_j m_j^2 = 0.$$

En fixant $c_0 = 1$, ces conditions sont équivalentes à

$$c_1 = \frac{m_0^2 - m_2^2}{m_2^2 - m_1^2} \quad \text{and} \quad c_2 = \frac{m_1^2 - m_0^2}{m_2^2 - m_1^2}.$$

Dans la limite ultraviolette (c'est-à-dire, $m_1, m_2 \rightarrow +\infty$), la régularisation n'empêche pas au modèle de garder une divergence logarithmique qui est bien connue dans le modèle BDF aussi. Pour mieux comprendre cette divergence dans ce nouveau cadre, on introduit donc le paramètre de *cut-off* ultraviolet moyen Λ comme étant égal à

$$\log(\Lambda^2) = - \sum_{j=0}^2 c_j \log(m_j^2). \quad (1.31)$$

Dans la jauge de Coulomb, l'énergie $E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}}$ régularisée par la méthode de Pauli-Villars est bien définie sous des hypothèses assez naturelles pour les champs $B = \text{curl} \mathbf{A}$, $B_{\text{ext}} = \text{curl} \mathbf{A}_{\text{ext}}$, $E = -\nabla V$ et $E_{\text{ext}} = -\nabla V_{\text{ext}}$. Le vide polarisé est donc décrit comme étant une solution du problème de min-max suivant:

$$\min_{\mathbf{A}} \max_V E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}}(\mathbf{A}). \quad (1.32)$$

Plus précisément, le vide est identifié avec le projecteur

$$\gamma_{\text{vac}}^{\text{PV}} = \chi_{(-\infty, 0]} \left(D_m^{e(\mathbf{A}_* + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right),$$

où $\mathbf{A}_* = (V_*, A_*)$ est un point-selle du problème (1.32). L'existence d'un tel point-selle est assurée quand le champ électromagnétique extérieur $\mathbf{F}_{\text{ext}} = (E_{\text{ext}}, B_{\text{ext}})$ est suffisamment faible.

Le vide polarisé. Avant de résoudre le problème (1.32) pour construire le vide polarisé, il faut définir proprement la fonctionnelle donnée par (1.30). Il est donc naturel de travailler dans l'espace homogène de Sobolev dans la jauge de Coulomb $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ qui a déjà été introduit dans la Section 1.1.2. Si $\mathbf{A}_{\text{ext}} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$, l'intégrale dans (1.30), qui donne l'énergie totale du champ électromagnétique extérieur, est bien définie. Il ne reste

donc qu'à montrer que la fonctionnelle

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}^0(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} \text{Tr} \sum_{j=0}^2 c_j \left(|D_{m_j}^0| - |D_{m_j}^{\mathbf{A}}| \right)$$

est bien définie pour $\mathbf{A} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. Le théorème suivant conclut la discussion:

Théorème 1.8 ([Gra+13, Theorem 2.1]). *Supposons que les coefficients c_j et les masses m_j , $j = 0, 1, 2$, vérifient*

$$c_0 = 1, \quad m_2 > m_1 > m_0 = m > 0, \quad \text{et} \quad \sum_{j=0}^2 c_j = \sum_{j=0}^2 c_j m_j^2 = 0. \quad (1.33)$$

(i) Soit

$$T_{\mathbf{A}}^0 = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^2 c_j \left(|D_{m_j}^0| - |D_{m_j}^{\mathbf{A}}| \right).$$

Si $\mathbf{A} \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$, l'opérateur $\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} T_{\mathbf{A}}^0$ est à trace sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. En particulier, la quantité $\mathcal{F}_{\text{PV}}^0(\mathbf{A})$ est bien définie par

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}^0(\mathbf{A}) = \text{Tr}(\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} T_{\mathbf{A}}^0).$$

(ii) La fonctionnelle $\mathcal{F}_{\text{PV}}^0$ peut être étendue à une fonctionnelle continue sur $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ de façon unique.

(iii) Soit $\mathbf{A} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. On a

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}^0(\mathbf{A}) = \mathcal{F}_2^0(\mathbf{F}) + \mathcal{R}^0(\mathbf{A}),$$

où $\mathbf{F} = (E, B)$ avec $E = -\nabla V$ et $B = \text{curl} A$. La fonctionnelle \mathcal{R}^0 est continue sur $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ et vérifie

$$|\mathcal{R}^0(\mathbf{A})| \leq K \left(\left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j} \right) \|\mathbf{F}\|_{L^2}^4 + \left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j^2} \right) \|\mathbf{F}\|_{L^2}^6 \right),$$

pour une constante universelle K .

(iv) La fonctionnelle \mathcal{F}_2^0 est une forme quadratique non négative et bornée sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4)$ donnée par

$$\mathcal{F}_2^0(\mathbf{F}) = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} M^0(q) \left(|\widehat{B}(q)|^2 - |\widehat{E}(q)|^2 \right) dq,$$

où

$$M^0(q) = -\frac{2}{\pi} \sum_{j=0}^2 c_j \int_0^1 u(1-u) \log(m_j^2 + u(1-u)|q|^2) du.$$

La fonction M^0 est positive et vérifie

$$0 < M^0(q) \leq M^0(0) = \frac{2 \log(\Lambda)}{3\pi},$$

avec Λ donné par (1.31).

On peut maintenant résoudre le problème (1.32) afin d'en dériver le vide polarisé. La

construction est possible à condition que le potentiel électromagnétique extérieur \mathbf{A}_{ext} soit suffisamment petit.

Théorème 1.9. *Supposons que les coefficients c_j et les masses m_j vérifient les conditions (1.33).*

(i) *Il existe un nombre $r > 0$ tel que, pour tout potentiel $\mathbf{A}_{\text{ext}} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ tel que*

$$e \|\mathbf{A}_{\text{ext}}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)} < \frac{r\sqrt{m}}{8},$$

il existe une unique solution $\mathbf{A}_ \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ du problème de min-max*

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}}(\mathbf{A}_*) &= \max_{\|\nabla V\|_{L^2} < \frac{r\sqrt{m}}{4e}} \inf_{\|\text{curl} A\|_{L^2} < \frac{r\sqrt{m}}{4e}} E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}} \\ &= \min_{\|\text{curl} A\|_{L^2} < \frac{r\sqrt{m}}{4e}} \sup_{\|\nabla V\|_{L^2} < \frac{r\sqrt{m}}{4e}} E_{\mathbf{A}_{\text{ext}}}^{\text{PV}}. \end{aligned}$$

(ii) *Si $\mathbf{A}_{\text{ext}} = 0$, la solution $\mathbf{A}_* = 0$.*

(iii) *Le potentiel \mathbf{A}_* est une solution des équations non linéaires suivantes:*

$$\begin{cases} -\Delta V_* = 4\pi e \rho_*, \\ -\Delta A_* = 4\pi e j_*, \end{cases}$$

où ρ_* et j_* sont donnés par

$$\rho_*(x) = [\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} Q_*](x, x) \quad \text{and} \quad j_*(x) = [\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \alpha Q_*](x, x),$$

Q_* étant donné par

$$Q_* = \sum_{j=0}^2 c_j \chi_{(-\infty, 0]} \left(D_{m_j}^{e(\mathbf{A}_* + \mathbf{A}_{\text{ext}})} \right).$$

On renvoie le lectorat intéressé à [Gra+13, Theorem 2.3, Theorem 2.4] pour plus de détail sur la construction du vide polarisé. On remarque que la construction est locale et valide seulement pour des champs électromagnétiques suffisamment petits. À notre connaissance, l'existence d'une solution globale du problème (1.32) demeure un problème ouvert. De plus, l'existence d'un minimum (local) en présence de champs électromagnétiques très forts demeure un problème ouvert aussi, qui en particulier demanderait de mieux comprendre le phénomène de création de paires électron-positron (voir [Sab12]).

La formule d'Euler-Heisenberg. On a vu comment définir rigoureusement l'énergie du vide $\mathcal{F}_{\text{PV}}^0$ à l'aide de la méthode de régularisation de Pauli-Villars afin d'en enlever les divergences ultraviolettes. Cependant, $\mathcal{F}_{\text{PV}}^0$ demeure une fonctionnelle de \mathbf{A} très compliquée, notamment à cause de sa nature non locale. Une approximation simple et utile, très bien connue dans la littérature physique, consiste à remplacer cette fonctionnelle par une superposition de problèmes locaux indépendants, c'est-à-dire

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}^0 \simeq \int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{PV}}^0(eE(x), eB(x)) dx,$$

où $f_{\text{PV}}^0(eE, eB)$ devrait représenter l'énergie par unité de volume correspondante à un champ électromagnétique $\mathbf{F} = (E, B)$ qui est constant partout dans l'espace. La fonction

f_{PV}^0 a été calculée pour la première fois par Euler et Heisenberg [HE36] en 1936. Des dérivations alternatives ont ensuite été présentées par Weisskopf [Wei36] et Schwinger [Sch51], qui a introduit une technique largement utilisée par la suite en physique, connue sous le nom de *proper time method*. En particulier, dans son article, il donne une interprétation de la partie imaginaire de cette fonction (obtenue par l'application de sa méthode) comme représentant le taux de création des paires électron-positron. On trouve la première dérivation rigoureuse de cette approximation dans [GLS18]. Dans cet article, les auteurs considèrent le vide de Dirac interagissant avec un champ magnétique classique et s'intéressent à la limite dans laquelle le champ magnétique est faiblement variable. Dans ce régime, ils montrent que l'énergie du vide de Dirac polarisé converge vers la fonctionnelle d'Euler-Heisenberg. À cet effet, on a le résultat suivant:

Théorème 1.10 ([GLS18, Theorem 2]). *Soit $B \in C^0(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ tel que $\operatorname{div} B = 0$ et*

$$B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3) \quad \text{and} \quad \nabla B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^6(\mathbb{R}^3).$$

Soit A le potentiel magnétique associé dans $\dot{H}_{\operatorname{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ et $A_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-1}A(\varepsilon x)$. Alors on a que

$$\varepsilon^3 \mathcal{F}_{\text{PV}}^0(0, eA_\varepsilon) = \int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{PV}}^0(e|B(x)|) dx + O(\varepsilon),$$

où

$$f_{\text{PV}}^0(b) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \left(\sum_{j^0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (sb \coth(sb) - 1) \frac{ds}{s^3}$$

est l'énergie du vide d'Euler-Heisenberg régularisée selon Pauli-Villars.

1.3 Présentation des résultats du Chapitre 2

Le Chapitre 2, qui porte sur l'étude de la dynamique d'électrons relativistes interagissant avec un nombre fini de noyaux atomiques dans le vide de Dirac, correspond au travail [Mor23].

1.3.1 Cadre général et principal résultat

Dans cette sous-section, on veut introduire le modèle qui est étudié dans le Chapitre 2 et ensuite énoncer le résultat principal. On travaille avec des électrons relativistes interagissant avec un nombre fini M de noyaux classiques de charge z_k , de barycentre \bar{x}_k et de masse m_k , $k = 1, \dots, M$, dans le vide de Dirac. On appelle f_k les distributions de charge correspondantes telles que $f_k \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \cap \mathcal{C}$, $1 \leq k \leq M$, où \mathcal{C} est l'espace de Coulomb défini dans (1.20) et muni du produit scalaire $\mathcal{D}(\cdot, \cdot)$ défini dans (1.21). On remarque immédiatement que $\mathcal{C} = \dot{H}^{-1}(\mathbb{R}^3)$. Il faut la régularité L^1 pour que les fonctions soient normalisées (ce qui est physiquement raisonnable), c'est-à-dire

$$\int_{\mathbb{R}^3} f_k(x) dx = 1, \quad 1 \leq k \leq M.$$

On sait que la dynamique de Bogoliubov-Dirac-Fock d'un nombre fini d'électrons relativistes est décrite par l'équation suivante (voir Éq (1.23)):

$$i \frac{d}{dt} P(t) = [D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}, P(t)], \quad (1.34)$$

où l'opérateur de champ moyen à l'instant t ,

$$D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M} = \mathcal{P}_\Lambda \left(D_1^0 - \alpha \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k|) * \frac{1}{|\cdot|} + \alpha \rho_Q * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|} \right) \mathcal{P}_\Lambda$$

est un opérateur borné auto-adjoint bien défini sur \mathfrak{H}_Λ . Dans ce chapitre, on pose la constante de Planck réduite \hbar , la vitesse de la lumière c ainsi que la masse m égales à 1. On remarque que sans la projection orthogonale \mathcal{P}_Λ de $L^2(\mathbb{R}^3)$ sur \mathfrak{H}_Λ l'opérateur $D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}$ ne préserverait pas l'espace de Hilbert \mathfrak{H}_Λ . On remarque aussi que les coordonnées nucléaires $\bar{x}_k(t)$ sont ici des paramètres pour l'opérateur de champ moyen. Dans plusieurs contextes, on peut simplement s'en débarrasser, en négligeant le mouvement des noyaux: les noyaux ne bougent donc pas et on ne doit que considérer (1.34). Comme on souhaite décrire des situations où la dynamique des noyaux est importante, telles que les réactions chimiques, on couple (1.34) avec

$$m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M), \quad (1.35)$$

où

$$W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M) = \alpha \mathcal{D} \left(\rho_Q, \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k|) \right) - \alpha \sum_{1 \leq i < j \leq M} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{z_i f_i(|x - \bar{x}_i|) z_j f_j(|y - \bar{x}_j|)}{|x - y|} dx dy$$

prend en compte la contribution donnée par le produit scalaire défini dans l'espace de Coulomb \mathcal{C} décrivant l'interaction de Coulomb entre les électrons et les noyaux et les interactions noyau-noyau. Éq. (1.35) signifie que dans l'approximation discutée ci-dessus, le centre d'inertie du noyau se déplace en obéissant à la dynamique newtonienne dans le potentiel électrostatique créé par les électrons et les noyaux. On peut introduire maintenant l'espace de Hilbert,

$$\mathcal{H}_\Lambda = \{Q \in \mathfrak{S}_2 \mid \rho_Q \in \mathcal{C}\},$$

muni de la norme suivante:

$$\|Q\| = \left(\|Q\|_{\mathfrak{S}_2}^2 + \|\rho_Q\|_{\mathcal{C}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Finalement, on considère

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} P(t) = [D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}, P(t)], \\ m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M), \quad k = 1, \dots, M, \\ P(0) = P_I, P(t)^2 = P(t), Q(t) = P(t) - P(0) \in \mathcal{H}_\Lambda, \\ \bar{x}_k(0) = \bar{x}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \frac{d\bar{x}_k}{dt}(0) = \bar{v}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \quad k = 1, \dots, M. \end{cases} \quad (1.36)$$

En associant l'énergie BDF bien définie,

$$E^{\text{BDF}}(Q) = \text{Tr}_{P_1^0} \left(D_1^0 Q \right) - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_Q, \sum_{k=1}^M z_k f_k \right) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\rho_Q, \rho_Q) - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy,$$

(agissant sur $Q = P - P_1^0 \in \mathcal{H}_\Lambda$, P étant un projecteur orthogonal) avec l'énergie newtonienne bien connue, on peut définir l'énergie du système décrit par (1.36) comme suit:

$$\begin{aligned} E^{(M)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \dots, \bar{x}_M(t)) &= \text{Tr}_{P_1^0} \left(D_1^0 Q(t) \right) - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|) \right) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\rho_{Q(t)}, \rho_{Q(t)}) \\ &\quad - \frac{\alpha}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M m_k |\dot{\bar{x}}_k(t)|^2 \\ &\quad + \alpha \sum_{1 \leq i < j \leq M} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{z_i f_i(|x - \bar{x}_i(t)|) z_j f_j(|y - \bar{x}_j(t)|)}{|x - y|} dx dy. \end{aligned}$$

Dans [CSN19], les auteurs introduisent la dynamique relativiste dans le modèle de [CL99], en remplaçant l'opérateur de Schrödinger par l'opérateur de Dirac. Ils décrivent ainsi l'évolution temporelle d'un électron relativiste interagissant avec un nombre fini de noyaux, sans tenir en compte les effets de la mer de Dirac interagissant avec les champs électriques externes nucléaires et électroniques. Ils prouvent un résultat d'existence locale sous une contrainte sur la charge totale des noyaux. Notre objectif principal ici consiste à étendre à la fois le résultat prouvé dans [HLS05c] en incluant la dynamique nucléaire dans l'évolution temporelle du système et le résultat prouvé dans [CL99] en prenant en compte les effets quantiques relativistes tels que la polarisation du vide. On veut donc montrer que le problème de Cauchy (1.36) est globalement bien posé, c'est-à-dire que le système a une solution globale unique dans un espace fonctionnel approprié qui sera discuté dans le Chapitre 2. On peut maintenant énoncer le résultat principal:

Théorème 1.11. *Soit $0 \leq \alpha < 4/\pi$ et $f_k \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}$, $k = 1, \dots, M$. Soit P_I un projecteur orthogonal tel que $Q_I = P_I - P_1^0 \in \mathcal{H}_\Lambda$ et $\bar{x}_k^0, \bar{v}_k^0 \in \mathbb{R}^3$, $k = 1, \dots, M$. Alors il existe une unique solution globale*

$$(Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M) \in C^1([0, +\infty), \mathcal{H}_\Lambda) \times \left(C^2([0, +\infty), \mathbb{R}^3) \right)^M$$

du système (1.36). De plus, $Q(t) = P(t) - P_1^0$ est à P_1^0 -trace et

$$\text{Tr}_{P_1^0}(Q(t)) = \text{Tr}_{P_1^0}(Q_I)$$

et

$$E^{(M)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \dots, \bar{x}_M(t)) = E^{(M)}(Q_I, \bar{x}_1^0, \dots, \bar{x}_M^0),$$

pour tout $t \in [0, +\infty)$.

1.4 Présentation des résultats du Chapitre 3

Le Chapitre 3, qui porte sur l'étude de l'énergie libre du vide de Dirac à température positive dans le cas purement magnétique, correspond au travail [Mor24].

1.4.1 Dérivation du modèle

Dans cette sous-section, on veut définir l'énergie libre du vide de Dirac à température positive. Pour cela, on considère d'abord un champ fermionique placé dans un potentiel électromagnétique donné $\mathbf{A} = (V, A)$ dans le formalisme de la seconde quantification. Le potentiel est fixé et l'on cherche l'énergie de l'état fondamental du champ de Dirac dans ce potentiel \mathbf{A} donné. Le hamiltonien du champ s'écrit

$$\mathbb{H}^{e\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left(\Psi^*(x) D_m^{e\mathbf{A}} \Psi(x) - \Psi(x) D_m^{e\mathbf{A}} \Psi^*(x) \right) dx,$$

où Ψ est l'opérateur de champ en seconde quantification et

$$D_m^{e\mathbf{A}} = \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla - eA) + eV + m\beta$$

est l'opérateur de Dirac électromagnétique agissant sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. On remarque donc que dans ce chapitre on pose la constante de Planck réduite \hbar et la vitesse de la lumière c égales à 1. Le hamiltonien $\mathbb{H}^{e\mathbf{A}}$ agit formellement sur l'espace de Fock fermionique,

$$\mathcal{F} = \mathbb{C} \oplus \bigoplus_{N \geq 1} \bigwedge^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4),$$

et il a la propriété importante d'invariance par conjugaison de charge,

$$C\mathbb{H}^{e\mathbf{A}}C^{-1} = \mathbb{H}^{-e\mathbf{A}},$$

où C est l'opérateur de conjugaison de charge dans l'espace de Fock (voir [Tha92, Formule (1.81)]). L'espérance de l'énergie dans un état quelconque de l'espace de Fock peut être exprimée comme suit:

$$\langle \mathbb{H}^{e\mathbf{A}} \rangle = \text{Tr} \left[D_m^{e\mathbf{A}} \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) \right] = E(\gamma), \quad (1.37)$$

où γ est la matrice de densité à un corps associée à un certain état,

$$\gamma(x, y)_{\sigma, \nu} = \langle \Psi^*(x)_\sigma \Psi(y)_\nu \rangle.$$

La matrice de densité renormalisée dans (1.37) est une conséquence de l'invariance de la conjugaison de charge. Le lecteur intéressé peut trouver plus de détails dans [HLS07]. Les électrons étant des fermions, ils obéissent au principe d'exclusion de Pauli, ce qui implique que γ doit satisfaire $0 \leq \gamma \leq 1$ sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. D'autre part, tout opérateur γ vérifiant $0 \leq \gamma \leq 1$ provient formellement d'un état dans l'espace de Fock. Puisque l'énergie ne dépend de l'état des électrons qu'à travers la matrice densité γ , on peut reformuler notre problème en se concentrant sur l'opérateur plus simple γ et l'énergie correspondante (1.37).

On rappelle que l'on s'intéresse à l'état fondamental du vide à température positive T et donc on considère plutôt l'énergie libre suivante:

$$F(\gamma) = E(\gamma) - T \text{Tr} [S(\gamma)], \quad (1.38)$$

où

$$S(x) = -x \log x - (1-x) \log(1-x),$$

et la minimisation de la fonctionnelle d'énergie libre par rapport à γ doit être abordée. Dans ce chapitre, on fixe le potentiel électrique V à 0 et on se concentre sur la dérivation de l'énergie libre du vide de Dirac dans un champ magnétique externe à une température positive T . Ainsi, on n'a pas d'autre contrainte que $0 \leq \gamma \leq 1$. Ce choix permet de maintenir le spectre loin de 0 sans ajouter d'hypothèse supplémentaire sur la taille du potentiel et ainsi de localiser l'énergie sur des ensembles de taille fixe. Par [GKS23, Lemma 1.1], on sait que le seul point critique γ^* de la fonctionnelle (1.38), qui est aussi l'unique minimiseur par convexité, est donné par

$$\gamma^* = \frac{1}{1 + e^{D_m^{eA}/T}} = \frac{e^{-D_m^{eA}/2T}}{2 \cosh(D_m^{eA}/2T)}, \text{ hence } 1 - \gamma^* = \frac{1}{1 + e^{-D_m^{eA}/T}} = \frac{e^{D_m^{eA}/2T}}{2 \cosh(D_m^{eA}/2T)}.$$

Donc, la valeur correspondante de l'énergie libre est formellement égale à

$$\begin{aligned} F(\gamma^*) &= \text{Tr} \left[D_m^{eA} \left(\gamma^* - \frac{1}{2} \right) \right] - T \text{Tr} [S(\gamma^*)] \\ &= -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^{eA}}{2} \right) \right] = \mathcal{F}(eA, \beta). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Bien évidemment, cette énergie libre est infinie, sauf si notre modèle est considéré dans une boîte avec un *cut-off* ultraviolet [HLS07]. Afin de donner une signification mathématique claire à (1.39), on procède comme suit. Tout d'abord, on peut soustraire l'énergie libre (infinie) de la mer de Dirac libre et définir l'énergie libre relative comme suit:

$$\mathcal{F}_{\text{rel}}(eA, \beta) = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^0}{2} \right) - \log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^{eA}}{2} \right) \right]. \quad (1.40)$$

En soustrayant une constante infinie, on ne change pas formellement le problème variationnel qui nous intéresse, donc on ne change pas non plus les équations résultantes. Cependant, la fonction (1.40) n'est pas encore bien définie à cause des divergences ultraviolettes bien connues de cette théorie. Il est donc évident qu'il faut imposer un *cut-off* ultraviolet. On utilisera ici la technique de régularisation introduite par Pauli et Villars [PV49] en 1949. Bien évidemment, il ne s'agit pas du seul choix possible lorsque l'invariance de jauge doit être conservée (voir par exemple [Lei75] pour une approche alternative). Cette technique a déjà été largement présentée dans les sous-sections précédentes. Dans notre cadre, elle consiste à introduire la fonctionnelle d'énergie libre suivante:

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta) = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} \right) - \log \left(2 \cosh \frac{\beta D_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right) \right], \quad (1.41)$$

où $m_0 = m$, $c_0 = 1$ et les coefficients c_j et les masses m_j , $j = 0, 1, 2$, satisfont

$$\sum_{j=0}^2 c_j = \sum_{j=0}^2 c_j m_j^2 = 0.$$

Afin de simplifier les calculs, on réécrit la fonctionnelle d'énergie libre régularisée par Pauli-Villars sous une forme intégrale. Pour cela, on dérive (1.41) par rapport à β en

obtenant

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta)) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^{eA} \tanh \frac{\beta D_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right],$$

qui implique

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta) = \frac{1}{2\beta} \int_0^\beta \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{b D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^{eA} \tanh \frac{b D_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right] db.$$

1.4.2 Principaux résultats

On peut maintenant énoncer l'un des principaux résultats du Chapitre 3, à savoir que la fonctionnelle d'énergie libre régularisée \mathcal{F}_{PV} est bien posée et que ses propriétés sont connues.

Théorème 1.12. *Supposons que c_j and m_j vérifient*

$$c_0 = 1, \quad m_2 > m_1 > m_0 > 0 \quad \text{and} \quad \sum_{j=0}^2 c_j = \sum_{j=0}^2 c_j m_j^2 = 0.$$

Soit

$$T_A(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^A \tanh \frac{\beta D_{m_j}^A}{2} \right).$$

(i) *Pour tout $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$, l'opérateur $T_A(\beta)$ est à trace sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, bien défini par rapport à β et borné dans un voisinage de $\beta = 0$. En particulier, dans ce cas $\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta)$ est donné par*

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_A(b)) db.$$

(ii) *Soit $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. On a*

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) = \mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) + \mathcal{R}(A, \beta),$$

où $B = \text{curl}A$. La fonctionnelle \mathcal{R} est de classe C^∞ sur $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ et il existe une constante universelle $\kappa = \kappa(\beta)$ telle que

$$|\mathcal{R}(A, \beta)| \leq \kappa \left(\left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j} \right) \|B\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^4 + \left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j^2} \right) \|B\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^6 \right).$$

La fonctionnelle $\mathcal{F}_{\text{PV},2}$ est une forme quadratique non négative et bornée sur $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ donnée par

$$\mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(M^0(q) + M^T(q, \beta) \right) |\hat{B}(q)|^2 dq,$$

avec

$$M^0(q) = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j \log \left(m_j^2 + u(1-u)q^2 \right) u(1-u) du$$

et

$$M^T(q, \beta) = -\frac{8}{\pi} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left[\frac{1}{1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}} + \frac{1}{X_j(\beta, u, q) \cosh t} (2 \log 2 - \log \left((e^{X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) (e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) \right)) \right] dt u (1 - u) du,$$

où $X_j(b, u, q) = b\sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2}$ pour $j = 0, 1, 2$.

En effet, la fonction M^0 est bien définie et positive sur \mathbb{R}^3 , et vérifie

$$0 < M^0(q) \leq M^0(0) = \frac{2 \log \Lambda}{3\pi}, \quad (1.42)$$

où Λ est le cut-off ultraviolet moyen associé à la régularisation de Pauli-Villars. De plus, M^T est bien défini, borné et tel que

$$M^0(q) + M^T(q, \beta) \geq 0. \quad (1.43)$$

En particulier, la fonctionnelle \mathcal{F}_{PV} peut être étendue à une fonctionnelle continue sur $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ de façon unique.

La fonction M^0 décrit la réponse linéaire de la mer de Dirac à température nulle. Elle a été introduite dans le Théorème 1.8 et est très bien connue dans la littérature physique [GR09, Eq. (5.39)]. D'un point de vue mathématique, il a été prouvé dans [Gra+13] que

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left(\frac{2 \log \Lambda}{3\pi} - M^0(q) \right) = U(q) := \frac{|q|^2}{4\pi} \int_0^1 \frac{z^2 - z^4/3}{1 + |q|^2(1-z^2)/4} dz,$$

où la fonction U du côté droit a été calculée pour la première fois par Serber [Ser35] et Uehling [Ueh35]. La même fonction apparaît dans des travaux mathématiques antérieurs étudiant le cas purement électrostatique [HS03; HLS05b; GLS11]. Comme déjà mentionné, la régularisation de Pauli-Villars permet d'éliminer uniquement les divergences linéaires ultraviolettes. En effet, le terme de second ordre est toujours logarithmiquement divergent dans le domaine des hautes fréquences à cause de M^0 , comme le montre (1.42). D'autre part, M^T est la contribution à température finie T à la réponse linéaire du vide de Dirac. On remarque qu'elle est convergente sans qu'il soit nécessaire de la régulariser. En particulier, la décomposition en contribution à température nulle et en contribution thermique semble montrer que la divergence UV ne provient que du terme à température nulle. Il serait donc intéressant de prouver que la formule de renormalisation dans notre cas coïncide avec celle à température nulle. L'estimation (1.43) garantit que \mathcal{F}_{PV} est une fonctionnelle d'énergie libre bien définie d'un point de vue mathématique et physique. Pour toutes ces raisons, ce théorème est l'équivalent du Théorème 1.8 à température positive T et sera discuté beaucoup plus en détail dans le Chapitre 3.

La nature bornée du terme de second ordre $\mathcal{F}_{\text{PV},2}$ et du reste \mathcal{R} permet d'étendre de façon unique la fonctionnelle d'énergie libre régularisée par PV à tout l'espace $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. Cette propriété est importante pour le second résultat principal du Chapitre 3, qui dérive une formule d'Euler-Heisenberg pour l'énergie libre du vide à partir de la fonctionnelle d'énergie libre régularisée par PV, dans le régime de champs purement magnétiques lentement variables. Ainsi, on considère un champ magnétique de la forme $B_\varepsilon(x) = B(\varepsilon x)$, avec $B = \text{curl}A$ dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ et $A \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. Le théorème suivant nécessite un peu plus de régularité:

Théorème 1.13. Soit $B \in C^0(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ tel que $\operatorname{div} B = 0$,

$$B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad \nabla B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^6(\mathbb{R}^3),$$

et soit A le potentiel magnétique associé dans $\dot{H}_{\operatorname{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. Soit $A_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-1}A(\varepsilon x)$. Alors,

$$\varepsilon^3 \mathcal{F}_{\text{PV}}(A_\varepsilon, \beta) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(f_{\text{PV}}^0(|B(x)|) + f_{\text{PV}}^T(|B(x)|, \beta) \right) dx + O(\varepsilon),$$

où

$$f_{\text{PV}}^0(a) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (sa \coth(sa) - 1) \frac{ds}{s^3}$$

et

$$f_{\text{PV}}^T(a, \beta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} (sa \coth(sa) - 1) \sum_{n=1}^\infty (-1)^n e^{-\frac{\beta^2 n^2}{4s}} \frac{ds}{s^3}.$$

La fonction f_{PV}^0 est la fonction d'énergie d'Euler-Heisenberg bien connue à température nulle, qui a été introduite pour la première fois dans [HE36]. En fait, les auteurs y dérivent une fonction concave, décroissante et négative qui diverge plus vite que $|B|^2$ à l'infini. Pour cette raison, l'énergie totale du système, donnée dans la limite par un lagrangien local effectif, n'est pas bornée par dessous et le modèle est instable. La même fonction a ensuite été étudiée mathématiquement dans le même régime de champs purement magnétiques lentement variables dans [GLS18], où les auteurs dérivent une fonction d'énergie d'Euler-Heisenberg non négative qui garantit la stabilité du modèle correspondant (voir Théorème 1.10). De plus, ils découvrent que l'instabilité du lagrangien précédent était due à la renormalisation de la charge [GLS18, Section 2.3]. D'autre part, la fonction f_{PV}^T est la contribution de la température non nulle à la fonction d'énergie totale d'Euler-Heisenberg. À notre connaissance, il s'agit de la première dérivation rigoureuse de ce terme, que l'on trouve dans la littérature physique dans [Dit79] et [DG00, Équation (3.162)]. On remarque que la somme de Pauli-Villars n'est pas vraiment nécessaire pour rendre l'intégrale convergente. Elle semble plutôt provenir de la régularisation de la contribution de la température zéro (qui serait autrement divergente), comme expliqué ci-dessus. On remarque que ce que l'on trouve est légèrement différent de ce qui apparaît dans [Dit79]. En effet, la formule d'Euler-Heisenberg thermique que l'on trouve dans la littérature physique n'est pas un objet bien défini en raison des divergences ultraviolettes bien connues dans la QED. Comme expliqué précédemment, on traite ici ce problème en utilisant la technique de régularisation de Pauli-Villars.

1.5 Présentation des résultats du Chapitre 4

Le Chapitre 4, qui porte sur l'étude physique et numérique des effets dus au vide de Dirac (tels que la polarisation du vide et le décalage de Lamb) dans un modèle unidimensionnel effectif, correspond à un travail commun avec Timothée Audinet, Antoine Levitt et Julien Toulouse, bientôt disponible sur arXiv.

1.5.1 Introduction du modèle

Dans cette sous-section, on veut introduire le modèle qui est étudié dans le Chapitre 4. On considère un électron relativiste unidimensionnel sans spin dont les états sont décrits

par l'espace de Hilbert $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$. Ce système peut être décrit par un opérateur de Dirac 1D avec potentiel de type delta décrivant l'interaction électrostatique noyau-électron [Lap83; AT23],

$$\mathfrak{D}_Z = \mathfrak{D}_m^0 - Z\delta(x)\mathbf{I}_2, \quad (1.44)$$

où \mathfrak{D}_m^0 est l'opérateur de Dirac libre unidimensionnel,

$$\mathfrak{D}_m^0 = c\sigma_1 p_x + \sigma_3 mc^2,$$

avec $p_x = -id/dx$ l'opérateur impulsion, c la vitesse de la lumière, m la masse de l'électron, σ_1 et σ_3 les matrices de Pauli 2×2 ,

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$Z \geq 0$ la charge nucléaire et \mathbf{I}_2 la matrice identité 2×2 . Pour toutes les autres constantes physiques habituelles, on suppose des unités atomiques dans lesquelles $\hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$.

Le potentiel delta dans Éq. (1.44) rend en fait la définition de \mathfrak{D}_Z ambiguë. Il existe plusieurs opérateurs auto-adjoints \mathfrak{D}_Z compatibles avec la définition formelle ci-dessus. Comme dans [AT23], on choisit l'opérateur auto-adjoint \mathfrak{D}_Z défini comme ayant la même action que \mathfrak{D}_m^0 pour $x \neq 0$, c'est-à-dire

$$\mathfrak{D}_Z \psi = \mathfrak{D}_m^0 \psi \quad \text{sur} \quad \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

avec le domaine dépendant de Z [Šeb89; BD94; Hug97; Hug99; PR14],

$$\text{Dom}(\mathfrak{D}_Z) = \left\{ \psi \in H^1(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C}^2) \mid \psi(0^+) = M_Z \psi(0^-) \right\}. \quad (1.45)$$

Dans Éq. (1.45), $H^1(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C}^2) \simeq H^1(\mathbb{R}^-, \mathbb{C}^2) \oplus H^1(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}^2)$ et M_Z est la matrice 2×2 unitaire, imposant une condition aux limites en $x = 0$ [SB72; Lap83; FLB12], suivante:

$$M_Z = \begin{bmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix},$$

avec $\theta = 2 \arctan(Z/2c)$.

L'opérateur \mathfrak{D}_Z a un seul état propre avec énergie [Lap83; CN87; NB86; AT23]

$$\varepsilon_b^Z = mc^2 \frac{1 - (Z/2c)^2}{1 + (Z/2c)^2} \quad (1.46)$$

et fonction propre

$$\psi_b^Z(x) = A_b \begin{bmatrix} 1 \\ i \text{sign}(x) Z/2c \end{bmatrix} e^{-\kappa_b |x|},$$

où sign est la fonction signe, $\kappa_b = mZ/(1 + (Z/2c)^2)$ et $A_b = \sqrt{\kappa_b/(1 + (Z/2c)^2)}$. On remarque que la composante supérieure (dite « grande ») de la fonction propre de l'état est une fonction paire de x , tandis que la composante inférieure (dite « petite ») est une fonction impaire de x avec une discontinuité en $x = 0$. En plus de la valeur propre ε_b^Z , l'opérateur \mathfrak{D}_Z possède également un spectre essentiel $(-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty)$. Pour $Z = 0$, le spectre de l'opérateur se réduit à la partie essentielle $(-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty)$. L'énergie de l'état propre dans Éq. (1.46) est strictement positive pour $Z < 2c$. De plus, la valeur propre correspondant à l'énergie de l'état propre ne plonge jamais dans

la partie négative du spectre essentiel pour tous les $Z > 0$. L'énergie de l'état propre ne s'approche de la partie négative du spectre essentiel que lorsque $Z \rightarrow \infty$, c'est-à-dire $\lim_{Z \rightarrow \infty} \varepsilon_b^Z = -mc^2$. Il n'y a donc pas d'effets QED supercritiques dans le modèle pris en compte [LS90; NPT90].

En passant par les fonctions de Green associées aux hamiltoniens \mathfrak{D}_Z et \mathfrak{D}_m^0 , on peut calculer la densité totale de polarisation du vide,

$$n^{\text{vp}}(x) = \mathcal{N}_0^{\text{vp}} \delta(x) + n_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x),$$

où

$$\mathcal{N}_0^{\text{vp}} = \frac{Z/c}{\pi \left(1 + (Z/2c)^2\right)}$$

et la partie régulière est donnée par $n_{\text{reg}}^{\text{vp}} = \text{Tr} \left[\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp}} \right]$ avec

$$\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x) = -\frac{Z}{4c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} e^{-2\kappa(iu)|x|} [z_1(iu) C_1(x, u) + z_2(iu) C_2(x, u)],$$

avec les matrices

$$C_1(x, u) = \begin{bmatrix} g(iu)^2 & -i \text{sign}(x) g(iu) \\ i \text{sign}(x) g(iu) & 1 \end{bmatrix},$$

$$C_2(x, u) = \begin{bmatrix} 1 & -i \text{sign}(x) g(-iu) \\ i \text{sign}(x) g(-iu) & g(-iu)^2 \end{bmatrix},$$

et $g(\omega) = \sqrt{(mc^2 + \omega)/(mc^2 - \omega)}$, $z_1(\omega) = (1 - Zg(\omega)/2c)^{-1}$ et $z_2(\omega) = (1 + Zg(-\omega)/2c)^{-1}$. De plus, on peut aussi calculer la densité de polarisation du vide de Uehling, correspondant au premier ordre en Z de la densité totale, comme étant

$$n^{\text{vp},(1)}(x) = \frac{Z}{\pi c} \delta(x) + n_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x),$$

où la contribution régulière a la forme suivante [AT23]:

$$n_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x) = -\frac{Zm}{\pi} \int_1^{\infty} \frac{e^{-2mc|x|t}}{t\sqrt{t^2 - 1}} dt.$$

L'approximation numérique de ces deux quantités sur une base finie d'ondes planes est le sujet de la prochaine sous-section, où l'on discute brièvement des problèmes principaux liés à la convergence ainsi que des résultats obtenus grâce aux méthodes développées.

1.5.2 Principaux résultats numériques

On considère une approximation de dimension finie de l'espace de Hilbert, en introduisant un *cut-off* infrarouge (IR) L et un *cut-off* ultraviolet (UV) Λ ,

$$\mathfrak{h}_{L,\Lambda} = \text{Vect} \left(\left\{ \chi_n^L \right\}_{|n| \leq n_{\text{max}}} \cup \left\{ \chi_n^S \right\}_{|n| \leq n_{\text{max}}} \right),$$

qui est engendrée par une base d'ondes planes pour la grande et la petite composante, $\chi_n^L, \chi_n^S : [-L/2, L/2] \rightarrow \mathbb{C}^2$, telles que

$$\chi_n^L(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{bmatrix} e^{ik_n x} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \chi_n^S(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{bmatrix} 0 \\ e^{ik_n x} \end{bmatrix},$$

avec $k_n = 2\pi n/L$ et $n_{\max} = \lfloor L\Lambda/(2\pi) \rfloor$. Physiquement, cela correspond à un électron sur l'intervalle $[-L/2, L/2]$ avec une impulsion maximale $|k_{n_{\max}}| \leq \Lambda$. En définitive, on s'intéressera aux limites $L \rightarrow \infty$ et $\Lambda \rightarrow \infty$.

L'équation aux valeurs propres pour l'opérateur de Dirac hydrogénoïde unidimensionnel, $\mathfrak{D}_Z \psi_p^Z = \varepsilon_p^Z \psi_p^Z$, sur cet espace de Hilbert de dimension finie conduit à l'équation matricielle aux valeurs propres suivante:

$$\begin{bmatrix} mc^2 \mathbf{I} + \mathbf{V} & c\mathbf{P} \\ c\mathbf{P} & -mc^2 \mathbf{I} + \mathbf{V} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_p^L \\ \mathbf{c}_p^S \end{bmatrix} = \varepsilon_p^Z \begin{bmatrix} \mathbf{c}_p^L \\ \mathbf{c}_p^S \end{bmatrix}, \quad (1.47)$$

où \mathbf{c}_p^L et \mathbf{c}_p^S sont des vecteurs à $(2n_{\max} + 1)$ composantes et \mathbf{I} , \mathbf{P} et \mathbf{V} sont des matrices $(2n_{\max} + 1) \times (2n_{\max} + 1)$ définies par les éléments suivants:

$$\mathbf{I}_{n,m} = \langle \chi_n^L, \chi_m^L \rangle_L = \langle \chi_n^S, \chi_m^S \rangle_L = \delta_{n,m},$$

$$\mathbf{P}_{n,m} = \langle \chi_n^L, \sigma_1 p_x \chi_m^S \rangle_L = \langle \chi_n^S, \sigma_1 p_x \chi_m^L \rangle_L = k_n \delta_{n,m},$$

et

$$\mathbf{V}_{n,m} = -Z \chi_n^{L*}(0) \chi_m^L(0) = -Z \chi_n^{S*}(0) \chi_m^S(0) = -\frac{Z}{L},$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$ désigne ici le produit scalaire standard dans $L^2([-L/2, L/2], \mathbb{C}^2)$. On remarque que, puisque $\sigma_1 p_x \chi_n^L = k_n \chi_n^S$ et $\sigma_1 p_x \chi_n^S = k_n \chi_n^L$, la base d'ondes planes vérifie la condition de *kinetic balance* dans toutes ses variantes (voir, par exemple, [SH84; Kut84; Sha+04; SLK11; SS20; GQ22; SS23]). Cela garantit que, lorsque $c \rightarrow \infty$, la limite non relativiste avec la même base est correctement atteinte. De plus, par analogie avec le cas 3D, puisque la base d'ondes planes est adaptée à l'opérateur de Dirac libre \mathfrak{D}_m^0 , on s'attend à ce qu'elle évite toute pollution spectrale [LS09; LS14].

Après avoir résolu Éq. (1.47), on obtient $4n_{\max} + 2$ fonctions propres de la forme suivante:

$$\psi_p^Z(x) = \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} c_{p,n}^L \chi_n^L(x) + \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} c_{p,n}^S \chi_n^S(x),$$

qui peut être décomposée en un ensemble d'états d'énergie positive (PS) $\{\psi_p^Z\}_{p \in \text{PS}}$ et un ensemble d'états d'énergie négative (NS) $\{\psi_p^Z\}_{p \in \text{NS}}$. La matrice de densité de polarisation du vide peut alors être calculée, pour un *cut-off* IR L et un *cut-off* UV Λ donnés, comme suit:

$$\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = \sum_{p \in \text{NS}} \psi_p^Z(x) \psi_p^{Z*}(x) - \sum_{p \in \text{PS}} \psi_p^0(x) \psi_p^{0*}(x),$$

où $\{\psi_p^0\}$ sont les fonctions propres pour $Z = 0$ calculées dans la même base. La densité de polarisation du vide correspondante est $n_{L,\Lambda}^{\text{VP}} = \text{Tr}[\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}]$.

La densité totale de polarisation du vide $n_{L,\Lambda}^{\text{VP}}$ calculée sur une base d'ondes planes avec un *cut-off* IR $L = 10$ et un *cut-off* UV $\Lambda = 50$ est reportée dans Fig. 1.3 et comparée à la densité exacte. Le calcul dans la base d'ondes planes reproduit bien la densité de polarisation dans le vide pour x suffisamment grand. Cependant, la base d'ondes planes

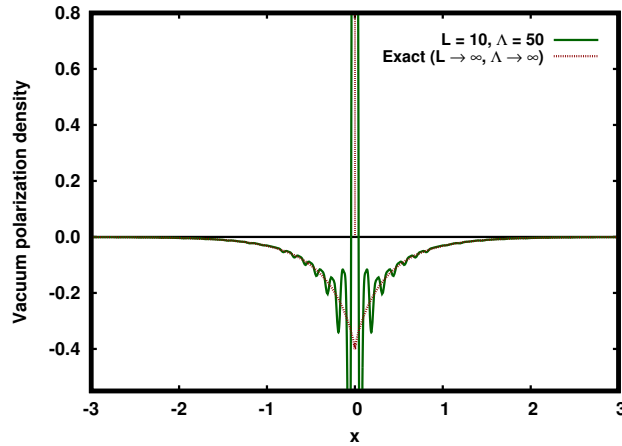


Figure 1.3 – La densité totale de polarisation du vide pour $m = c = Z = 1$, calculée exactement sur une base d’ondes planes pour un *cut-off* IR $L = 10$ et un *cut-off* UV $\Lambda = 50$.

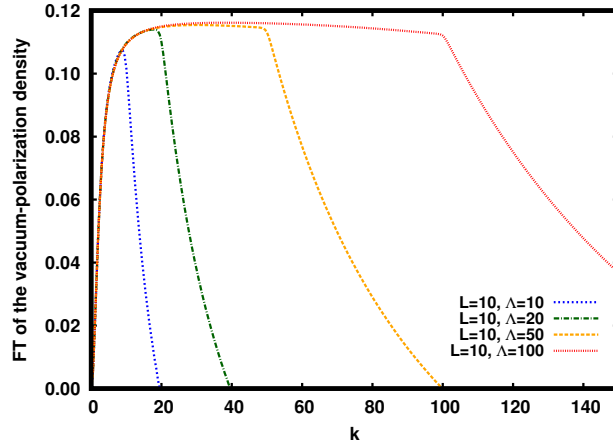


Figure 1.4 – Transformée de Fourier de la densité totale de polarisation du vide calculée sur une base d’ondes planes pour un *cut-off* IR $L = 10$ et plusieurs *cut-off* UV Λ avec $m = c = Z = 1$.

gène de grandes oscillations autour de $x = 0$ à cause de la contribution du delta de Dirac, ce qui entraîne une convergence ponctuelle impossible de la densité de polarisation du vide autour de $x = 0$. Pour analyser ce problème de convergence, on reporte dans Fig. 1.4 la transformée de Fourier de la densité totale de polarisation du vide calculée sur la base des ondes planes,

$$\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{vp}}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L/2}^{L/2} n_{L,\Lambda}^{\text{vp}}(x) e^{-ikx} dx.$$

Afin de reproduire la contribution due au delta de Dirac à la densité de polarisation du vide dans l’espace des positions, $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{vp}}$ devrait tendre vers une constante lorsque $k \rightarrow \infty$. Cependant, avec un *cut-off* UV fini Λ , la transformée de Fourier $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{vp}}$ n’est capable d’atteindre approximativement une constante que pour $k \lesssim \Lambda$, mais pour $k \gtrsim \Lambda$ décroît rapidement pour être égale à zéro à $k = 2\Lambda$.

Cela suggère un simple schéma numérique, qui est décrit en détail dans le Chapter 4,

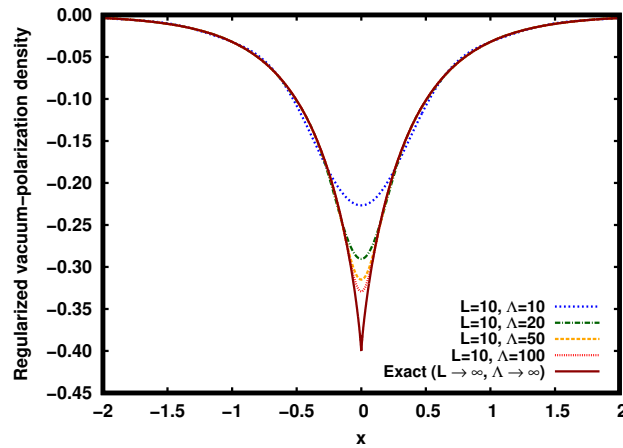


Figure 1.5 – Densité totale de polarisation du vide régularisée pour $m = c = Z = 1$ calculée sur une base d’ondes planes pour un *cut-off* IR $L = 10$ et plusieurs *cut-off* UV Λ , comparée à la partie régulière exacte de la densité totale de polarisation du vide.

permettant d’extraire la partie régulière de la densité de polarisation du vide dans une base finie. La densité de polarisation du vide régularisée obtenue par ce schéma est reportée dans Fig. 1.5 pour différentes valeurs du *cut-off* UV Λ . On remarque que notre schéma de régularisation a correctement écarté les grandes oscillations autour de $x = 0$ et que la densité de polarisation du vide régularisée converge effectivement vers la partie régulière de la densité de polarisation du vide exacte lorsque le *cut-off* UV croît. Cette convergence reste cependant lente près de $x = 0$ car la partie régulière de la densité de polarisation du vide exacte a une discontinuité de dérivée infinie en $x = 0$.

1.6 Conclusions et perspectives

Dans ce travail de thèse, on a principalement étudié d’un point de vue mathématique, physique ainsi que numérique le vide de Dirac, potentiellement en présence d’un champ électromagnétique et d’électrons. Ce système est décrit à l’aide de modèles non linéaires issus d’approximations de champ moyen de l’électrodynamique quantique. En particulier, on a traité le cas non stationnaire, c’est-à-dire en présence d’un potentiel électrique externe dépendant du temps, ainsi que le cas à température positive et le cas unidimensionnel.

En abordant une équation de Bogoliubov-Dirac-Fock couplée avec un nombre fini d’équations de Newton, on a amélioré la compréhension de la dynamique moléculaire dans un cadre où les effets quantiques ainsi que les effets relativistes doivent être pris en compte, tel que celui des atomes lourds. Il s’agit aussi d’une étape supplémentaire dans l’étude du modèle BDF en présence d’un potentiel externe dépendant du temps: il serait intéressant de se concentrer sur ce même modèle mais sous des hypothèses de régularité plus faibles pour le potentiel considéré. De plus, il serait raisonnable de pouvoir montrer qu’aucune collision entre noyaux ne peut se produire, à condition d’améliorer nos estimations sur l’énergie totale du système. En effet, pour l’instant on a été obligé d’ajouter cette hypothèse *a priori*.

Concernant le modèle à température positive, on a montré qu’il est possible de définir la fonctionnelle d’énergie libre du vide de Dirac en présence d’un champ purement magnétique. Cette fonctionnelle étant très compliquée, on a aussi fourni une dérivation rigoureuse de son approximation d’Euler-Heisenberg dans le régime de champs magnétiques faible-

ment variables. En particulier, on a remarqué que les contributions dues à la température positive ne sont pas divergentes dans le domaine des hautes fréquences et au contraire convergent vers les termes correspondants non régularisés dans la limite ultraviolette. Il serait donc intéressant d'étudier la formule de renormalisation dans ce cadre: on s'attend à ce qu'elle soit égale à celle à température nulle. Il serait également important d'analyser le problème en présence d'un potentiel électrique s'ajoutant à celui magnétique. Pour l'instant, on n'a pas réussi à l'inclure dans notre modèle à cause de la discrétisation du paramètre ω issue de la condition d'antipériodicité due aux effets thermiques, qui empêche l'utilisation de la méthode d'intégration par partie.

Finalement, on s'est concentré sur l'étude computationnelle des effets dus au vide de Dirac, en introduisant un modèle unidimensionnel effectif issu de la QED décrivant des atomes hydrogénoïdes avec interaction de type delta. En particulier, on a discuté formellement des quantités physiques d'intérêt du modèle telles que la polarisation du vide et le décalage de Lamb, avant de se concentrer sur les aspects liés à l'approximation numérique en base finie. On a présenté notamment des méthodes pour l'amélioration de la convergence des estimations de la densité de polarisation du vide et du décalage de Lamb de l'état fondamental. En raison de la nature essentiellement numérique et formelle de ce dernier chapitre, de nombreuses questions d'ordre mathématique demeurent ouvertes. Il serait donc intéressant d'établir d'abord un cadre mathématique général pour l'étude rigoureuse du modèle en question afin de confirmer les prédictions physiques et numériques obtenues. Il serait également intéressant de poursuivre l'étude computationnelle afin de développer des techniques numériques similaires pour une théorie tridimensionnelle effective décrivant atomes et molécules dans le cadre de la QED.

Chapter 2

Relativistic electrons coupled with Newtonian nuclear dynamics

This chapter is a slightly modified version of [\[Mor23\]](#).

Abstract

In the study of the electronic structure of heavy atoms, relativistic effects cannot be neglected anymore and the Dirac operator naturally appears in place of the Schrödinger operator, raising up a number of additional difficulties. The complexity of these systems has been addressed by various approximations.

In this work, we consider a model consisting of differential equations coupling the time evolution of a finite number of relativistic electrons with the Newtonian dynamics of finitely many nuclei, where the former is described by the Bogoliubov-Dirac-Fock (BDF) equation of quantum electrodynamics (QED). A global well-posedness result is achieved by addressing the Cauchy problem for this model. We believe that this system can be seen as a first step in the study of molecular dynamics phenomena, when both relativistic and quantum effects have to be considered.

Contents

1	Introduction	45
1.1	The Bogoliubov-Dirac-Fock model	46
1.2	The classical dynamics for nuclei	48
2	The general setting and main result	50
3	Local existence	52
3.1	Local existence for the BDF equation	53
3.2	Local existence for the Newton equation	56
3.3	Schauder fixed-point argument	58
4	Uniqueness	59
5	Global-in-time existence	60

1 Introduction

In quantum chemistry several approximations of the time-independent Schrödinger equation have been deeply studied in the past decades, leading to extremely accurate results in the calculation of the ground state of molecules containing several hundreds of electrons. Nevertheless, it is quite evident that these models are insufficient to study dynamical phenomena such as chemical reactions which rule the behaviour of matter. For this reason, quantum chemists have been encouraged to study models in the time-dependent case.

Whenever relativistic effects have to be taken into account, the Dirac operator naturally appears in place of the Schrödinger operator, raising up a number of additional difficulties which will be profoundly discussed later on. As before, approximations become necessary in order to deal with the complexity of the system. The main purpose of this paper is to study the global well-posedness of the Cauchy problem associated with a Bogoliubov-Dirac-Fock dynamics of a finite number of relativistic electrons coupled with classical dynamics of finitely many nuclei. In our opinion, this model could be considered as a further step towards a better comprehension of dynamical phenomena when both relativistic and quantum effects have to be taken into account. This work has been deeply inspired by a paper of Cancès and Le Bris [CL99] where the authors consider a non-adiabatic approximation of the Schrödinger equation such that the electrons are ruled by time-dependent Hartree-Fock equations and the nuclei-electrons interaction is of Hellmann-Feynman type. In this section, we introduce the free Dirac operator to describe the relativistic dynamics of electrons and discuss in detail all the mathematical and physical difficulties carried by this operator. This leads us to talk about the Bogoliubov-Dirac-Fock (BDF) model, which is a mean-field approximation of quantum electrodynamics (QED) allowing us to overcome all these problems. In particular, this model allows us to consider electrons interacting with the quantum vacuum in addition to the electron-electron and nucleus-electron interactions. Indeed, in QED the vacuum is not an empty space, but rather a fluctuating medium behaving as a non-linear polarisable material. Later we discuss the dynamics of the nuclei, by justifying the classical approximation of their nature that we take into account.

In Section 2, we carefully introduce our model describing a finite number of relativistic electrons obeying the time-dependent BDF equation and interacting with the Newtonian dynamics of a finite number of nuclei whose centres of mass are considered to be classical and interacting themselves with the relativistic electrons. We state our main result in the most general form, but then the proof presented in the following sections is restricted to the case with only two nuclei for the sake of simplicity. It is important to notice that our argument applies to any system consisting of a finite number of nuclei and electrons without any remarkable change. Notice that in the one nucleus case the nucleus-nucleus interaction term can be neglected and computations are slightly simpler.

In Section 3 and Section 4, we prove a local existence and uniqueness result for the solution of the two-nuclei model by Schauder fixed-point theorem and a standard application of Grönwall's lemma. Here it is important to carefully define a suitable functional space in order to work on the correct functional framework and apply our fixed-point argument.

In Section 5, we extend the results of the previous sections by proving the global-in-time existence of the maximal solution by means of the conservation of energy of the system. Here the pattern of the proof follows a standard argument used in [HLS05c].

It is important to remark that we assume that no collisions happen between nuclei throughout this work since the conservation of energy does not prevent them a priori. Indeed, a

proof of this result would require some additional estimates on the vacuum-nuclei Coulomb interaction term. It would be interesting to study this problem in more detail in the next future. Moreover, notice that due to the assumptions our model cannot cover some physical situations. For instance, it is well known that the motion of charged nuclei creates magnetic fields which are not taken into account by this model. In this case, the situation becomes much more complicated and different models giving a better approximation should be addressed. In particular, more sophisticated regularisation techniques need to be considered in order to deal with ultraviolet divergence by preserving the gauge invariance as explained in [Gra+13; GLS18]. This will be the object of future investigations.

1.1 The Bogoliubov-Dirac-Fock model

The dynamics of relativistic quantum spin-1/2 particles is described by the free Dirac operator,

$$D^0 = -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta = -i \sum_{k=1}^3 \alpha_k \partial_k + \beta,$$

acting on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, introduced by Dirac in 1928 [Dir28], where $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ and

$$\beta = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}, \quad \alpha_k = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{bmatrix},$$

with

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

We point out that we choose a system of units such that $\hbar = c = 1$ and the mass m_e of the electron is equal to 1 as well. We refer to [Tha92] for a detailed reading about this operator and its properties, which have been and are currently deeply studied. For our purpose, it is enough to know that its spectrum is not bounded from below. Indeed,

$$\sigma(D^0) = (-\infty, -1] \cup [1, +\infty). \quad (2.1)$$

This leads to important mathematical, physical and numerical difficulties. In particular, (2.1) led Dirac to postulate that the vacuum is filled with infinitely many virtual particles occupying the negative energy states (Dirac sea) [Dir30; Dir34a; Dir34b]. The distribution of negative energy electrons is postulated to be unobservable because of its uniformity. As a consequence, a real free electron cannot be in a negative state due to the Pauli principle. Moreover, Dirac conjectured the existence of "holes" in the Dirac sea interpreted as positrons, having a positive charge and a positive energy. Dirac also predicted the phenomenon of vacuum polarisation: in the case of an external electric field, the virtual electrons align their charges with the field direction and the vacuum obtains a non-constant density of charge. Actually the polarised vacuum modifies the electrostatic field and the virtual electrons react to the corrected field.

The vacuum polarisation is negligible in the calculation of Lamb shift for the ordinary hydrogen atom, but it is crucial for high- Z atoms [MPS98]. Indeed, for heavy atoms it is necessary to take relativistic effects into account. Nevertheless, we are not able to define the equivalent of the N -body non-relativistic (Hartree-Fock) theory by replacing the Schrödinger operator with the Dirac operator, because of the negative part of its spectrum. The correct theory is quantum electrodynamics which is the quantum field theory of electrons and positrons (the electron-positron field) and photons (the electromagnetic

field). Its predictive success about the interaction between matter and light relies on perturbation theory. However, its description in terms of perturbative calculations restricts the range of physical situations where it can be applied. A mathematically consistent non-perturbative formulation of QED is still unknown and the argumentation above makes it an interesting open problem. To overcome the difficulty, several mean-field models have been proposed and studied in the past decades in order to get a first approximation. In particular, effective models deduced from non-relativistic theories (such as the Dirac-Fock model) suffer from inconsistencies: for instance, a ground state never minimises the physical energy which is always unbounded from below. We refer the reader to [ELS08] for a complete review about the argument.

The phenomenon of vacuum polarisation described above suggests that mathematically speaking we need to find a self-consistent equation for the polarised vacuum and to solve it by a standard fixed-point argument. In physics, self-consistent equations are usually derived as Euler-Lagrange equations of an energy functional. For instance, this is the case in the non-relativistic Hartree-Fock model. Instead, the same argument does not apply to the Dirac-Fock model, precisely because of the unboundedness from below of the spectrum of the Dirac operator. For this reason, we need to study the Bogoliubov-Dirac-Fock energy functional, first introduced by Chaix and Iracane in 1989 [CI89]. They derive their mean-field model from the QED Hamiltonian by neglecting the contribution of photons (the electromagnetic field is not quantised) and normal-ordering it with respect to the free projector,

$$P^0 = \chi_{(-\infty, 0)}(D^0),$$

as a fixed reference. They do not neglect the vacuum polarisation terms by pointing out their importance for the consistency of the relativistic mean-field theory. This model describes the behaviour of a finite number of spin-1/2 particles coupled to that of the Dirac sea which can become polarised. Indeed, the introduction of the vacuum in the model is the solution to deal with the negative energies of the Dirac operator and obtain a bounded-below energy functional, whose minimisers are well defined ground states. Finally we get a model which is more accurate (taking into account vacuum polarisation effects), more physically sensible and whose ground states have a proper definition. On the other hand, one has to deal with infinitely many particles (the real ones and the virtual ones of the Dirac sea) instead of the finite number of electrons. Moreover, it is not easy to give a meaning to the quantities involved in our model because several divergent quantities appear in QED even after normal ordering. We refer the reader to [Hai+07] for a brief and precise review about the argument.

Mathematically speaking, for any $Q = P - P^0 \in \mathfrak{S}_2(L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4))$ (P being an orthogonal projector), the BDF energy can be formally written as follows:

$$E(Q) = \text{Tr}(D^0 Q) - \alpha \int \rho_Q \varphi + \frac{\alpha}{2} \iint \frac{\rho_Q(x) \rho_Q(y)}{|x-y|} dx dy - \frac{\alpha}{2} \iint \frac{|Q(x, y)|^2}{|x-y|} dx dy, \quad (2.2)$$

where $\rho_Q(x) = \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} Q(x, x)$ is the charge density associated to Q and $\mathfrak{S}_2(L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4))$ denotes the class of Hilbert-Schmidt operators on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. Here, φ is the external electrostatic potential created by the (non-negative) charge distribution f , namely $\varphi = f * |\cdot|^{-1}$. By formal computation, we can show that the Euler-Lagrange equation of this functional is

$$[P, D_Q] = 0, \quad (2.3)$$

where

$$D_Q = D^0 - \alpha\varphi + \alpha\rho_Q * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|}$$

is the so called mean-field operator taking into account not only external fields, but also the self-consistent potential created by the state $P(t)$ itself. In the time-dependent case, Eq. (2.3) modifies into

$$i \frac{d}{dt} P(t) = [D_{Q(t)}, P(t)].$$

We have to deal with several difficulties in order to well define the BDF energy in (2.2). First of all, we have to deal with divergences in the high-frequencies domain to be able to define, for instance, the density ρ_Q . In this case, one possible solution is to introduce an ultraviolet cut-off $\Lambda > 0$, by replacing the ambient space $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ with

$$\mathfrak{H}_\Lambda = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4) \mid \text{supp } \hat{f} \subseteq B(0, \Lambda) \right\}.$$

Secondly, we need to find a way to define $\text{Tr}(D^0 Q)$ and for this reason the definition of trace functional has to be extended to a bigger class of compact operators. In [HLS05a], the authors define an operator $A \in \mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)$ to be P^0 -trace class if $A^{++} = (1 - P^0) A (1 - P^0) \in \mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_\Lambda)$ and $A^{--} = P^0 A P^0 \in \mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_\Lambda)$ (the set of all trace class operators). The associated P^0 -trace of A is then given by

$$\text{Tr}_{P^0} A = \text{Tr} A^{++} + \text{Tr} A^{--}.$$

The set of all P^0 -trace class operators is denoted by $\mathfrak{S}_1^{P^0}(\mathfrak{H}_\Lambda)$. Notice that we do not assume the Cauchy boundary condition to be trace class, since this property is not conserved along the solution, namely $Q(t) \notin \mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_\Lambda)$ as soon as $t > 0$, even if the initial data $Q(0)$ is assumed to be $\mathfrak{S}_1(\mathfrak{H}_\Lambda)$.

It was proved in [HLS05a, Lemma 2] that any difference of two projectors satisfying $Q = P - P^0 \in \mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)$ (Shale-Stinespring criterion) is automatically in $\mathfrak{S}_1^{P^0}(\mathfrak{H}_\Lambda)$ and moreover $\text{Tr}_{P^0}(Q)$ is always an integer. Thus the P^0 -trace is a suitable tool for describing charge sectors, which is crucial when we want to work with physical systems containing also a finite number q of real electrons in addition to the infinite virtual ones. Indeed, in this case we need to minimise the well defined BDF energy in a fixed charge sector, i.e. under the constraint $\text{Tr}_{P^0}(Q) = q$. Later in this paper, we will see that this quantity is conserved all along the BDF dynamics. This allows us to study the interaction between a finite number of relativistic electrons and a finite number of classical nuclei.

We refer the reader to [HLS05a; HLS05b; HLS07; GLS09; HLS09] for all the rigorous details and main results about the BDF model.

1.2 The classical dynamics for nuclei

The Born-Oppenheimer approximation is one of the most known and useful mathematical approximations to deal with molecular dynamics in quantum chemistry. It allows simplifying the Schrödinger equation by treating separately the wavefunctions of atomic nuclei and electrons. However there are physical situations where this approximation does not work, like for instance in presence of a time-dependent electric field. We refer the reader to [CL99, Paragraphs 2.2 and 2.3] for a more detailed discussion about the adiabatic approximation, which is a generalisation of the Born-Oppenheimer approximation, and its range of applications.

In order to deal with this kind of situations, we need to introduce another model to study

the dynamics of the nuclei. Since it is well known in the literature that point-like sources create divergences in classical electrodynamics as well as in QED [LAH56], we take nuclear charge distributions centred in the centres of mass of the corresponding nuclei and suppose them to be classical. The physical explanation of this approximation relies on the fact that atomic nuclei are much heavier than electrons: indeed, the mass of a nucleon is approximately 1836 times the mass of an electron. Hence, the approximation about the classical nature of the centres of mass of the nuclei holds because the quantum nature of the nuclei can be neglected since most of quantum phenomena shows up with a probability which decreases exponentially with the mass of the particle. Thus, this approximation is almost always valid in chemistry and allows us to study the time evolution of atomic nuclei from a classical point of view.

Let us consider M nuclei and denote by m_k and z_k respectively the mass and the charge of the k -th nucleus. The state of the system is then classically described at time t as a point in the phase space given by the coordinates of the centres of mass,

$$\left(\bar{x}_k(t), \frac{d\bar{x}_k(t)}{dt} \right)_{1 \leq k \leq M} \in \mathbb{R}^{6M}.$$

Moreover we assume that the k -th nucleus carries a density of charge f_k which creates the corresponding electrostatic potential $\varphi_k(t) = z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|) * \frac{1}{|\cdot|}$ at time t . We do not need to fix the sign of the charge density from a mathematical point of view, but we can think about a non-negative function in order to represent for instance a system of nuclei in a molecule. As explained before, we recall that point-like charge distributions are forbidden because it is well known that they create divergences in QED. Thus we assume that $f_k \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \cap \mathcal{C}$, $1 \leq k \leq M$, where

$$\mathcal{C} = \left\{ \rho \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^3) \mid \widehat{\rho} \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3), \mathcal{D}(\rho, \rho) < \infty \right\}$$

is the Coulomb space endowed with the following scalar product:

$$\mathcal{D}(\rho_1, \rho_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\widehat{\rho}_1(k) \widehat{\rho}_2(k)}{|k|^2} dk.$$

We immediately remark that $\mathcal{C} = \dot{H}^{-1}(\mathbb{R}^3)$. We need the L^1 -regularity in order to suppose the functions to be normalised (which is physically reasonable), namely

$$\int_{\mathbb{R}^3} f_k(x) dx = 1, \quad 1 \leq k \leq M.$$

The choice of the functional space for the charge density is not a constraint from a physical point of view since point-like nuclear charge distributions do not exist in nature and our approximation is useful only from a dynamical point of view.

Remark 2.1. Actually in the sequel of this paper the charge distributions f_k are required to be more regular. Indeed, in Theorem 2.2 the distribution of charge is needed to belong additionally to $L^2(\mathbb{R}^3)$. Mathematically speaking this is a technical constraint, but from a computational point of view this is not excessively restrictive since quantum chemists are used to choose nuclear charge distributions which are kindly smooth as explained in [VD97]. \diamond

2 The general setting and main result

We are now ready to introduce the complete model which is studied in this work. We work on relativistic electrons interacting with a finite number M of classical nuclei of charge z_k and mass m_k , $k = 1, \dots, M$. Let us call f_k the corresponding charge distributions with the regularity properties described in the previous section. The Bogoliubov-Dirac-Fock dynamics of any finite number of relativistic electrons is described by the following equation:

$$i \frac{d}{dt} P(t) = [D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}, P(t)], \quad (2.4)$$

where the mean-field operator at time t ,

$$D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M} = \mathcal{P}_\Lambda \left(D^0 - \alpha \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k|) * \frac{1}{|\cdot|} + \alpha \rho_Q * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|} \right) \mathcal{P}_\Lambda$$

is a well defined self-adjoint bounded operator on \mathfrak{H}_Λ . Notice that without the orthogonal projection \mathcal{P}_Λ of $L^2(\mathbb{R}^3)$ onto \mathfrak{H}_Λ the operator $D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}$ would not preserve the Hilbert space \mathfrak{H}_Λ . We remark that the nuclear coordinates $\bar{x}_k(t)$ are here parameters for the mean-field operator. In several context, we can just get rid of them, by neglecting the motion of the nuclei: therefore the nuclei do not move and we only have to deal with Eq. (2.4). Since we are interested in describing situations where the dynamics of the nuclei is important, such as chemical reactions, we couple (2.4) with

$$m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M), \quad (2.5)$$

where

$$W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M) = \alpha \mathcal{D} \left(\rho_Q, \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k|) \right) - \alpha \sum_{1 \leq i < j \leq M} \int \int \frac{z_i f_i(|x - \bar{x}_i|) z_j f_j(|y - \bar{x}_j|)}{|x - y|} dx dy$$

takes into account the contribution given by the scalar product defined in the Coulomb space \mathcal{C} describing the Coulomb interaction between electrons and nuclei and the nucleus-nucleus interactions. Eq. (2.5) means that in the approximation discussed above the centre of mass of the nucleus moves obeying the Newtonian dynamics in the electrostatic potential created by electrons and nuclei. We now introduce our main Hilbert space,

$$\mathcal{H}_\Lambda = \{Q \in \mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda) \mid \rho_Q \in \mathcal{C}\},$$

endowed with the following norm:

$$\|Q\| = \left(\|Q\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)}^2 + \|\rho_Q\|_{\mathcal{C}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Thus, we finally consider the following:

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} P(t) = [D_{Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M}, P(t)], \\ m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M), \quad k = 1, \dots, M, \\ P(0) = P_I, P(t)^2 = P(t), Q(t) = P(t) - P(0) \in \mathcal{H}_\Lambda, \\ \bar{x}_k(0) = \bar{x}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \frac{d\bar{x}_k}{dt}(0) = \bar{v}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \quad k = 1, \dots, M. \end{cases} \quad (2.6)$$

By combining the well defined BDF energy,

$$\begin{aligned} E^{\text{BDF}}(Q) &= \text{Tr}_{P^0} \left(D^0 Q \right) - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_Q, \sum_{k=1}^M z_k f_k \right) \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\rho_Q, \rho_Q) - \frac{\alpha}{2} \int \int_{\mathbb{R}^6} \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy, \end{aligned}$$

(acting on $Q = P - P^0 \in \mathcal{H}_\Lambda$, P being an orthogonal projector) with the well known Newtonian energy, we can define the energy of the system described by (2.6) as follows:

$$\begin{aligned} E^{(M)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \dots, \bar{x}_M(t)) &= \text{Tr}_{P^0} \left(D^0 Q(t) \right) - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, \sum_{k=1}^M z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|) \right) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D}(\rho_{Q(t)}, \rho_{Q(t)}) \\ &\quad - \frac{\alpha}{2} \int \int \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M m_k |\dot{\bar{x}}_k(t)|^2 \\ &\quad + \alpha \sum_{1 \leq i < j \leq M} \int \int \frac{z_i f_i(|x - \bar{x}_i(t)|) z_j f_j(|y - \bar{x}_j(t)|)}{|x - y|} dx dy. \end{aligned}$$

In [CSN19], the authors introduce the relativistic dynamics in the model of [CL99], by replacing the Schrödinger operator by the Dirac operator. In this way, they describe the time evolution of one relativistic electron interacting with finitely many nuclei, without considering the effects of the Dirac sea interacting with the nuclear and electronic external electric fields. They prove a local existence result under a constraint on the total charge of the nuclei. Our main purpose here consists of extending both the result proved in [HLS05c] by including the nuclear dynamics into the time evolution of the system and the result proved in [CL99] by taking into account relativistic quantum effects such as vacuum polarisation. Therefore we want to show the global well-posedness of Cauchy problem (2.6), namely that the system has a unique global solution in a suitable functional space which is discussed later on. We can now state our main result whose proof is detailed in the sequel of this paper.

Theorem 2.2. *Let $0 \leq \alpha < 4/\pi$ and $f_k \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}$, $k = 1, \dots, M$. Let P_I be an orthogonal projector such that $Q_I = P_I - P^0 \in \mathcal{H}_\Lambda$ and $\bar{x}_k^0, \bar{v}_k^0 \in \mathbb{R}^3$, $k = 1, \dots, M$. Then there exists a unique global solution*

$$(Q, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_M) \in C^1([0, +\infty), \mathcal{H}_\Lambda) \times \left(C^2([0, +\infty), \mathbb{R}^3) \right)^M$$

of system (2.6). Moreover, $Q(t) = P(t) - P^0$ is P^0 -trace class and

$$\mathrm{Tr}_{P^0}(Q(t)) = \mathrm{Tr}_{P^0}(Q_I)$$

and

$$E^{(M)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \dots, \bar{x}_M(t)) = E^{(M)}(Q_I, \bar{x}_1^0, \dots, \bar{x}_M^0),$$

for all $t \in [0, +\infty)$.

3 Local existence

As said in Section 1, for the sake of simplicity we prove the main result of this work in the case with only two nuclei of mass m_1, m_2 , charge z_1, z_2 and charge distribution f_1, f_2 satisfying the hypotheses discussed above. We start by proving a local existence result for solutions of the evolution problem (2.6) written in terms of $Q(t) = P(t) - P^0$, namely

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} Q(t) = F(Q), \\ m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2), \quad k = 1, 2, \\ Q(0) = Q_I := P_I - P^0 \in \mathcal{H}_\Lambda, \\ \bar{x}_k(0) = \bar{x}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \quad \frac{d\bar{x}_k}{dt}(0) = \bar{v}_k^0 \in \mathbb{R}^3, \quad k = 1, 2, \end{cases} \quad (2.7)$$

where

$$F(Q) = [D_{Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2}, Q] + [V_{Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2}, P^0]$$

acts on \mathcal{H}_Λ , with

$$V_{Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2} = \mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha (\rho_Q - z_1 f_1(|\cdot - \bar{x}_1|) - z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2|)) * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|} \right) \mathcal{P}_\Lambda.$$

In order to do that, we want to use a Schauder fixed-point argument and it is then important to define carefully a suitable functional framework where correctly applying our machinery.

We denote by $B_{\mathcal{H}_\Lambda}(0, \|Q_I\|)$ the ball of radius $\|Q_I\|$ centered at the origin in the operator space \mathcal{H}_Λ , equipped with the corresponding topology. Then, F is continuous on $B_{\mathcal{H}_\Lambda}(0, \|Q_I\|)$ with respect to the \mathcal{H}_Λ topology (we refer the reader to Lemma 2.4 below for a proof of its continuity). Indeed, because of the presence of a quadratic term, F needs to be considered on a bounded space in order to be continuous. Let us denote C_F the corresponding continuity constant of F , which will depend on the norm of the initial datum $\|Q_I\|$. We can then fix some arbitrary time $\tau > 0$ such that

$$\frac{1}{1 - \tau C_F} \leq 1, \quad (2.8)$$

$$\alpha \frac{\tau}{m_k} C_f (\|Q_I\| + C_f) \leq 1, \quad k = 1, 2, \quad (2.9)$$

where

$$C_f = \max_{k=1,2} \left\{ \sup_{\mathbb{R}^3} \|z_k \nabla f_k(|\cdot - x|)\|_{\mathcal{C}}, \sup_{\mathbb{R}^3} \|z_k f_k(|\cdot - x|)\|_{\mathcal{C}} \right\}.$$

Notice that τ will then depend on the norm of the initial datum and not on the initial

datum itself. Now, we can define the following sets:

$$\mathcal{B}_\tau^e = \left\{ Q \in C^1([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda) \mid \|Q\|_{C^0([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda)} \leq \|Q_I\| \right\},$$

$$\mathcal{B}_\tau^{n,k} = \left\{ \bar{x}_k \in C^1([0, \tau], \mathbb{R}^3) \mid \bar{x}_k(0) = \bar{x}_k^0, \frac{d\bar{x}_k}{dt}(0) = \bar{v}_k^0, \left\| \frac{d\bar{x}_k}{dt} \right\|_{C^0([0, \tau], \mathbb{R}^3)} \leq |\bar{v}_k^0| + 1 \right\},$$

$k = 1, 2,$

endowed with the topology of $C^0([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda)$ and the topology of $C^1([0, \tau], \mathbb{R}^3)$ respectively. In the sequel, we shall need to consider also the sets $\mathcal{B}_\tau^{n,k} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)$, $k = 1, 2$, equipped with the topology of $C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)$.

3.1 Local existence for the BDF equation

Let us now decouple the differential equations in (2.7) and focus on the Cauchy problem of the first one of them,

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} Q(t) = [D_{Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2}, Q] + [V_{Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2}, P^0], \\ Q(0) = Q_I = P_I - P^0 \in \mathcal{H}_\Lambda. \end{cases} \quad (2.10)$$

Before stating and proving the local existence for solutions of (2.10), let us state the following auxiliary lemma:

Lemma 2.3. *Let $g \in \mathcal{C}$ and $(\bar{x}_n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}^3$ be a sequence converging to $\bar{x} \in \mathbb{R}^3$. Then $\lim_{n \rightarrow \infty} g(|\cdot - \bar{x}_n|) = g(|\cdot - \bar{x}|)$ in \mathcal{C} .*

Proof. By the following calculation, one easily has

$$\begin{aligned} \|g(|\cdot - \bar{x}_n|) - g(|\cdot - \bar{x}|)\|_{\mathcal{C}}^2 &= \int \frac{\left| \widehat{g(|\cdot|)}(k) e^{i\langle \bar{x}_n, k \rangle} - \widehat{g(|\cdot|)}(k) e^{i\langle \bar{x}, k \rangle} \right|^2}{|k|^2} dk \\ &= \int \frac{\left| \widehat{g(|\cdot|)}(k) \right|^2}{|k|^2} \left| e^{i\langle \bar{x}_n, k \rangle} - e^{i\langle \bar{x}, k \rangle} \right|^2 dk. \end{aligned}$$

Let us now denote

$$\xi_n(k) = \frac{\left| \widehat{g(|\cdot|)}(k) \right|^2}{|k|^2} \left| e^{i\langle \bar{x}_n, k \rangle} - e^{i\langle \bar{x}, k \rangle} \right|^2.$$

The function ξ_n can be easily dominated by $4 \left| \widehat{g(|\cdot|)}(k) \right|^2 / |k|^2$ which is integrable by hypothesis, uniformly with respect to n . Moreover, ξ_n converges to zero pointwise, as $n \rightarrow \infty$, by hypothesis on the sequence $(\bar{x}_n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}^3$. The dominated convergence theorem allows us to conclude the proof. \square

We can now state the following lemma:

Lemma 2.4. *Let $\bar{x}_1 \in \mathcal{B}_\tau^{n,1}$ and $\bar{x}_2 \in \mathcal{B}_\tau^{n,2}$. Then system (2.10) has a unique (local) solution Q in $C^1([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda)$ which is also in \mathcal{B}_τ^e . Moreover, the map*

$$\mathcal{F}^{\text{BDF}} : (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2} \mapsto Q \in \mathcal{B}_\tau^e$$

is bounded and continuous.

Proof. By Cauchy's theorem we need to show that F is locally Lipschitz for the \mathcal{H}_Λ topology in order to have existence and uniqueness of a local solution of (2.10). Let $Q_1, Q_2 \in \mathcal{H}_\Lambda$. Hence,

$$\begin{aligned} F(Q_1) - F(Q_2) &= [V'_{Q_1 - Q_2}, P^0] + [D_{\bar{x}_1, \bar{x}_2}, Q_1 - Q_2] \\ &\quad + [V'_{Q_1} - V'_{Q_2}, Q_1] + [V'_{Q_2}, Q_1 - Q_2], \end{aligned}$$

where we have introduced the following notations:

$$\begin{aligned} V'_Q &= \mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha \rho_Q * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha \frac{Q(x, y)}{|x - y|} \right) \mathcal{P}_\Lambda, \\ D_{\bar{x}_1, \bar{x}_2} &= \mathcal{P}_\Lambda \left(D^0 - \alpha z_1 f_1(|\cdot - \bar{x}_1|) * \frac{1}{|\cdot|} - \alpha z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2|) * \frac{1}{|\cdot|} \right) \mathcal{P}_\Lambda. \end{aligned}$$

So we get four different terms which can all be estimated exactly as in the proof of [HLS05c, Lemma 3.1]. In particular, there exist constants C_1, C_2 and C_3 (dependent on the cut-off parameter Λ and on the Coulomb norms of the external charge distributions f_1, f_2) such that

$$\| [D_{\bar{x}_1, \bar{x}_2}, Q] \| \leq C_1 \|Q\|, \quad \| [V'_Q, Q'] \| \leq C_2 \|Q\| \|Q'\| \quad \text{and} \quad \| [V'_Q, P^0] \| \leq C_3 \|Q\|.$$

Notice that this proves also the continuity of F on $B_{\mathcal{H}_\Lambda}(0, \|Q_I\|)$ for the same topology. Now we need to prove that the application $\mathcal{F}^{\text{BDF}} : (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2} \mapsto Q \in \mathcal{B}_\tau^e$ is bounded and continuous. First of all, the map \mathcal{F}^{BDF} is well-defined. Indeed,

$$\|Q(t)\| = \|Q_I\| + \int_0^t \left\| \frac{dQ}{ds} \right\| ds \leq \|Q_I\| + \tau \|F(Q)\| \leq \|Q_I\| + \tau C_F \|Q(t)\|,$$

which easily implies $\|Q\|_{C([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda)} \leq \|Q_I\|$ by (2.8). Of course the application \mathcal{F}^{BDF} is bounded since \mathcal{B}_τ^e is bounded.

Let us now prove the continuity. Let $(\bar{x}_1^n, \bar{x}_2^n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$ a sequence converging to $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$. Let us denote $Q^n = \mathcal{F}^{\text{BDF}}(\bar{x}_1^n, \bar{x}_2^n)$ and $Q = \mathcal{F}^{\text{BDF}}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$. We want to prove that Q^n converges to Q in \mathcal{B}_τ^e . Thus,

$$\|Q^n - Q\| \leq \int_0^t \left\| \frac{d}{d\tau} (Q^n - Q) \right\| d\tau \leq \int_0^t \|F(Q^n) - F(Q)\| d\tau.$$

Since Q^n and Q correspond respectively to \bar{x}_1^n, \bar{x}_2^n and \bar{x}_1, \bar{x}_2 , we have now two more terms to estimate, which are the following ones:

$$\begin{aligned} &\left[\mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha \sum_{i=1}^2 z_i (f_i(|\cdot - \bar{x}_i|) - f_i(|\cdot - \bar{x}_i^n|)) * \frac{1}{|\cdot|} \right) \mathcal{P}_\Lambda, P^0 \right], \\ &\left[\mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha \sum_{i=1}^2 z_i (f_i(|\cdot - \bar{x}_i|) - f_i(|\cdot - \bar{x}_i^n|)) * \frac{1}{|\cdot|} \right) \mathcal{P}_\Lambda, Q^n \right]. \end{aligned}$$

Now, let us start noting that there exists a constant $\kappa > 0$ such that for any $g \in \mathcal{C}$

$$\left\| g * \frac{1}{|\cdot|} \right\|_{\mathfrak{S}_\infty(\mathfrak{H}_\Lambda)} \leq \kappa E(\Lambda) \|g\|_{\mathcal{C}},$$

where $E(\Lambda) = \sqrt{1 + \Lambda^2}$. This is an immediate consequence of the following inequality proved in [HLS05b, Proof of Theorem 1, Step 3]:

$$\left| g * \frac{1}{|\cdot|} \right| \leq \kappa \|g\|_{\mathcal{C}} |D^0|.$$

Thus,

$$\begin{aligned} & \left\| \left[\mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha \sum_{i=1}^2 z_i (f_i(|\cdot - \bar{x}_i|) - f_i(|\cdot - \bar{x}_i^n|)) * \frac{1}{|\cdot|} \right) \mathcal{P}_\Lambda, Q^n \right] \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \\ & \leq 2E(\Lambda) \alpha \kappa \left(z_1 \|\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n\|_{\mathcal{C}} + z_2 \|\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n\|_{\mathcal{C}} \right) \|Q^n\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \\ & \leq \underbrace{2E(\Lambda) \alpha \kappa}_{C_5} \left(z_1 \|\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n\|_{\mathcal{C}} + z_2 \|\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n\|_{\mathcal{C}} \right) \left(\|Q^n - Q\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} + \|Q\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \right). \end{aligned}$$

It is important to remark that in both the previous inequalities the constant κ does not depend on n .

Moreover, let $\varphi^n = \mathcal{P}_\Lambda \left(\alpha \sum_{i=1}^2 z_i (f_i(|\cdot - \bar{x}_i|) - f_i(|\cdot - \bar{x}_i^n|)) * \frac{1}{|\cdot|} \right) \mathcal{P}_\Lambda$. Since the kernel of $\varphi^n P^0$ in the Fourier domain is $(2\pi)^{3/2} \widehat{\varphi}^n(p - q) P^0(q)$, we get

$$\begin{aligned} \left| [\widehat{\varphi}^n, \widehat{P}^0](p, q) \right|^2 &= (2\pi)^3 \left| \widehat{\varphi}^n(p - q) \right|^2 \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left(P^0(p) - P^0(q) \right)^2 \\ &= 2(2\pi)^3 \left| \widehat{\varphi}^n(p - q) \right|^2 \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left(P^0(p) P_\perp^0(q) \right), \end{aligned}$$

where $P_\perp^0 = 1 - P^0$. By [HLS05a, Lemma 12], we have

$$\text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \left(P^0(p) P_\perp^0(q) \right) \leq \frac{|p - q|^2}{2E((p + q)/2)^2},$$

and thus

$$\left\| [\varphi_Q, P^0] \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)}^2 \leq (2\pi)^3 \iint_{|p|, |q| \leq \Lambda} \frac{\left| \alpha \left(z_1 (\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n) + z_2 (\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n) \right) (p - q) \right|^2}{|p - q|^2 E((p + q)/2)^2} dp dq,$$

which yields

$$\left\| [\varphi_Q, P^0] \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \leq \alpha C_4 \left(z_1 \|\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n\|_{\mathcal{C}} + z_2 \|\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n\|_{\mathcal{C}} \right),$$

where C_4 is some constant dependent on the cut-off parameter Λ and here \bar{f}_i and \bar{f}_i^n are short notations for $f_i(|\cdot - \bar{x}_i|)$ and $f_i(|\cdot - \bar{x}_i^n|)$, $i = 1, 2$, respectively.

Now, $\left\| \widehat{\rho}_{[\varphi^n, Q^n]} \right\|_{\mathcal{C}} = 0$. Indeed,

$$\begin{aligned} \widehat{\rho}_{[\varphi^n, Q^n]}(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\int \int \widehat{\varphi}^n \left(p + \frac{k}{2} - s \right) \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \widehat{Q}^n \left(s, p - \frac{k}{2} \right) dp ds \right. \\ & \quad \left. - \int \int \widehat{\varphi}^n \left(s - p + \frac{k}{2} \right) \text{Tr}_{\mathbb{C}^4} \widehat{Q}^n \left(p + \frac{k}{2}, s \right) dp ds \right] = 0, \end{aligned}$$

by the following variable transformation:

$$\begin{cases} s = p' + \frac{k}{2}, \\ p = s' + \frac{k}{2}. \end{cases}$$

Moreover $\rho_{[\varphi^n, P^0]} = 0$ because the Dirac matrices α_i , $i = 1, 2, 3$, and β have zero \mathbb{C}^4 -trace. Finally,

$$\|Q^n - Q\| \leq \int_0^t (\alpha_n + \beta_n \|Q^n - Q\|) ds,$$

where

$$\alpha_n = \sup_{\substack{s \in [0, \tau] \\ \bar{x}_1, \bar{x}_2 \in \mathbb{R}^3}} \left[(C_4 + C_5 \|Q(s)\|) \left(z_1 \|\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n\|_C + z_2 \|\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n\|_C \right) \right]$$

goes to zero as n goes to infinity by Lemma 2.3 and

$$\begin{aligned} \beta_n = \sup_{\substack{s \in [0, \tau] \\ \bar{x}_1, \bar{x}_2 \in \mathbb{R}^3}} & \left[C_1 + C_2 (\|Q(s)\| + \|Q^n(s)\|) + C_3 \right. \\ & \left. + C_5 \left(z_1 \|\bar{f}_1 - \bar{f}_1^n\|_C + z_2 \|\bar{f}_2 - \bar{f}_2^n\|_C \right) \right] \end{aligned}$$

is bounded. Thus, Grönwall's lemma allows us to conclude. \square

Remark 2.5. Notice that in the previous proof we get some rough estimates, since the upper bound is obtained by using the term $E(\Lambda)$ which is linear in Λ whereas in QED we would expect a logarithmic dependence (and in particular divergence) on the cut-off parameter. \diamond

3.2 Local existence for the Newton equation

Let us now focus on the Cauchy problem of the remaining equations in (2.7),

$$\begin{cases} m_k \frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2), & k = 1, 2, \\ \bar{x}_k(0) = \bar{x}_k^0, \quad \frac{d}{dt} \bar{x}_k(0) = \bar{v}_k^0, & k = 1, 2, \end{cases} \quad (2.11)$$

where we recall that

$$\begin{aligned} W_Q(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2) = \alpha \mathcal{D} & \left(\rho_Q, \sum_{i=1}^2 z_i f_i(|\cdot - \bar{x}_i|) \right) \\ & - \alpha \int \int \frac{z_1 f_1(|x - \bar{x}_1|) z_2 f_2(|y - \bar{x}_2|)}{|x - y|} dx dy. \end{aligned}$$

We immediately remark that we deal with a standard ODE and so we only have to pay attention to the source term W_Q . We are now ready to state and prove the following lemma:

Lemma 2.6. *Let $Q \in \mathcal{B}_\tau^c$. Then system (2.11) has a unique (local) solution in $(C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3))^2$ which is also in $\mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$. Moreover, the map*

$$\mathcal{F}^{\text{NEW}} : Q \in \mathcal{B}_\tau^c \longmapsto (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in \left(\mathcal{B}_\tau^{n,1} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3) \right) \times \left(\mathcal{B}_\tau^{n,2} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3) \right)$$

is bounded and continuous.

Proof. First of all, we remark that the nucleus-nucleus interaction term in W_Q can be rewritten as a scalar product in the Coulomb space due to our assumptions. Secondly we immediately know that system (2.11) has a unique local solution by Cauchy's theorem since a direct computation shows that $-\nabla_x W_Q$ is a well defined Lipschitz function. Now we want to prove that the map $\mathcal{F}^{\text{NEW}} : Q \in \mathcal{B}_\tau^e \mapsto (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in (\mathcal{B}_\tau^{n,1} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)) \times (\mathcal{B}_\tau^{n,2} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3))$ is bounded and continuous. First, the map \mathcal{F}^{NEW} is well defined. Indeed,

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d\bar{x}_k}{dt} \right\|_{C^0([0, \tau], \mathbb{R}^3)} &\leq \left| \bar{v}_k^0 \right| + \frac{\tau}{m_k} \sup_{[0, \tau] \times (\mathbb{R}^3)^2} |\nabla_{\bar{x}_k} W_Q| \\ &\leq \left| \bar{v}_k^0 \right| + \alpha \frac{\tau}{m_k} C_f \left(\|Q\|_{C^0([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda)} + C_f \right) \\ &\leq \left| \bar{v}_k^0 \right| + \alpha \frac{\tau}{m_k} C_f (\|Q_I\| + C_f) \\ &\leq \left| \bar{v}_k^0 \right| + 1, \quad k = 1, 2, \end{aligned}$$

where the last inequality is justified by (2.9).

Now let $(Q^n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{B}_\tau^e$ be a sequence converging to $Q \in \mathcal{B}_\tau^e$ in \mathcal{H}_Λ . We want to prove that

$$\mathcal{F}^{\text{NEW}}(Q^n) = (\bar{x}_1^n, \bar{x}_2^n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} (\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \mathcal{F}^{\text{NEW}}(Q).$$

Let $\tilde{x}_k^n = \bar{x}_k^n - \bar{x}_k$, $k = 1, 2$. Then, from

$$\begin{aligned} m_1 \frac{d^2}{dt^2} \tilde{x}_1^n(t) &= \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q^n(t)}, z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|) \right) \\ &\quad - \alpha \mathcal{D} \left(z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|), z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2^n(t)|) \right) \\ &\quad - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1(t)|) \right) \\ &\quad + \alpha \mathcal{D} \left(z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1(t)|), z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2(t)|) \right), \end{aligned}$$

we derive

$$\begin{aligned} m_1 \frac{d^2}{dt^2} \tilde{x}_1^n(t) &= \alpha \left[\mathcal{D} \left(\rho_{Q^n(t)-Q(t)}, z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|) \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, z_1 (\nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|) - \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1(t)|)) \right) \right] \\ &\quad - \alpha \left[\mathcal{D} \left(z_1 (\nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|) - \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1(t)|)), z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2^n(t)|) \right) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{D} \left(z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1(t)|), z_2 (f_2(|\cdot - \bar{x}_2^n(t)|) - f_2(|\cdot - \bar{x}_2(t)|)) \right) \right], \end{aligned}$$

which implies

$$\left| m_1 \frac{d^2}{dt^2} \tilde{x}_1^n(t) \right| \leq \alpha A_n + \alpha B_n (|\tilde{x}_1^n(t)| + |\tilde{x}_2^n(t)|),$$

where

$$A_n = \sup_{t \in [0, \tau]} \mathcal{D} \left(\rho_{Q^n(t)-Q(t)}, z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1^n(t)|) \right)$$

and

$$0 \leq B_n \leq \|z_1 f_1(|\cdot|\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} (\|\rho_Q\|_C + 2\|z_2 f_2(|\cdot|\cdot)\|_C).$$

Now $(B_n)_{n \in \mathbb{N}}$ is bounded since $\rho_Q \in \mathcal{C}$ and $f_1, f_2 \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}$ by hypotheses. Moreover, $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$ goes to zero when n goes to infinity. Indeed, it is enough to prove that $Q \in$

$\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda) \mapsto \mathcal{D}(\rho_Q, \nabla f(|\cdot|)) \in \mathbb{R}^3$ is continuous. This is actually true since

$$|\mathcal{D}(\rho_Q, \nabla f(|\cdot|))| \leq \|\nabla f(|\cdot|)\|_C \|\rho_Q\|_C$$

and we know that $Q \in \mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda) \mapsto \rho_Q \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}$ is continuous as explained for instance in [Sab14, (12)]. Likewise, the same estimate holds for \tilde{x}_2^n . Since $\tilde{x}_k^n(0) = \frac{d\tilde{x}_k^n}{dt}(0) = 0$, we get that \tilde{x}_k^n goes to zero in $C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)$ when n goes to infinity by Grönwall's lemma both for $k = 1$ and for $k = 2$. \square

3.3 Schauder fixed-point argument

We proved so far local existence results for both (2.10) and (2.11). We are now ready to take advantage of our previous work, by applying a standard fixed-point argument in order to prove a local existence result for system (2.7).

Theorem 2.7. *System (2.7) has a solution $(Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2)$ in*

$$C^1([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda) \times \left(C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)\right)^2.$$

Proof. Let us denote by i the compact injection

$$i : \left(\mathcal{B}_\tau^{n,1} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)\right) \times \left(\mathcal{B}_\tau^{n,2} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)\right) \longrightarrow \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}.$$

We can now define the functional $\mathcal{K} = i \circ \mathcal{F}^{\text{NEW}} \circ \mathcal{F}^{\text{BDF}}$ which maps $\mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$ into itself: if $(\bar{y}_1, \bar{y}_2) \in \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$, $\bar{z} = \mathcal{K}(\bar{y}_1, \bar{y}_2)$ satisfies

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} Q(t) = [D_{Q, \bar{y}_1, \bar{y}_2}, Q(t)] + [V_{Q, \bar{y}_1, \bar{y}_2}, P^0], \\ m \frac{d^2}{dt^2} \bar{z}_k(t) = -\nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{z}_1, \bar{z}_2), \quad k = 1, 2, \\ P(0) = P_I, P(t)^2 = P(t), Q(t) = P(t) - P(0) \in \mathcal{H}_\Lambda, \\ \bar{z}_k(0) = \bar{x}_k^0, \frac{d\bar{z}_k}{dt}(0) = \bar{v}_k^0, \quad k = 1, 2, \end{cases} \quad (2.12)$$

with $(P, \bar{z}_1, \bar{z}_2) \in \mathcal{B}_\tau^e \times \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$. The map \mathcal{K} is continuous and compact since \mathcal{F}^{NEW} and \mathcal{F}^{BDF} are continuous and bounded (by Lemma 2.6 and Lemma 2.4 respectively) and the injection i is continuous and compact. Since $\mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$ is convex and bounded, by Schauder fixed-point theorem \mathcal{K} has a fixed point $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in \mathcal{B}_\tau^{n,1} \times \mathcal{B}_\tau^{n,2}$ which is actually in $(\mathcal{B}_\tau^{n,1} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)) \times (\mathcal{B}_\tau^{n,1} \cap C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3))$ and $(P, \bar{x}_1, \bar{x}_2)$ is a solution of system (2.7) with $P = \mathcal{F}^{\text{BDF}}(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$. \square

We can now immediately state an important property of the solution of system (2.10), namely $P(t) = Q(t) + P^0$ is indeed a projection for any $t \in [0, \tau]$.

Lemma 2.8. *Let $(Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \in C^1([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda) \times (C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3))^2$ be given by Theorem 2.7. Then $P(t) = Q(t) + P^0$ is an orthogonal projector.*

Proof. See [HLS05c, Lemma 3.2]. \square

As a consequence, we deduce that $Q(t) = P(t) - P^0$ is P^0 -trace class and its P^0 -trace is conserved all along the time evolution. Indeed, by Lemma 2 in [HLS05a] we know that

$Q(t) = P(t) - P^0$ is P^0 -trace class and that its charge $\text{Tr}_{P^0}(Q(t))$ is an integer. Moreover,

$$\text{Tr}_{P^0}(Q(t)) = \text{Tr}(Q(t)^3), \forall t \in [0, \tau].$$

Since $t \in [0, \tau] \mapsto Q(t)$ is continuous in the $\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)$ and therefore also in the $\mathfrak{S}_3(\mathfrak{H}_\Lambda)$ topology, we get that $t \in [0, \tau] \mapsto \text{Tr}_{P^0}(Q(t))$ is continuous and hence constant, namely

$$\text{Tr}_{P^0}(Q(t)) = \text{Tr}_{P^0}(Q_I), \forall t \in [0, \tau].$$

4 Uniqueness

This section is devoted to prove a uniqueness result for the solution of system (2.7). Thus, we prove the following proposition, by a classical application of Grönwall's lemma:

Proposition 2.9. *The solution $(Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2)$ to (2.7) is unique in*

$$C^1((0, \tau), \mathcal{H}_\Lambda) \times \left(C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3)\right)^2.$$

Proof. Let (Q, x_1, x_2) and (Q', x'_1, x'_2) be two solutions of (2.7). Let $\tilde{x}_1 = x_1 - x'_1$, $\tilde{x}_2 = x_2 - x'_2$ and $\tilde{Q} = Q - Q'$. We define

$$h(t) = \left(|\tilde{x}_1(t)| + |\tilde{x}_2(t)| + \left\| \tilde{Q}(t) \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)}\right)^p,$$

with $p > 2$. By means of a computation like in the proof of Lemma 2.6, we get

$$\begin{aligned} m_1 \frac{d^2}{dt^2} \tilde{x}_1(t) &= \alpha [\mathcal{D}(\rho_{Q-Q'}, z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1|)) \\ &\quad + \mathcal{D}(\rho_{Q'}, z_1 (\nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1|) - \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}'_1|)))] \\ &\quad - \alpha [\mathcal{D}(z_1 (\nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1|) - \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}'_1|)), z_2 f_2(|\cdot - \bar{x}_2|)) \\ &\quad + \mathcal{D}(z_1 \nabla f_1(|\cdot - \bar{x}_1|), z_2 (f_2(|\cdot - \bar{x}_2|) - f_2(|\cdot - \bar{x}'_2|)))] \end{aligned}$$

and an easy computation shows that

$$\begin{aligned} |\tilde{x}_1(t)| &\leq \int_0^t (t-s) \left| \frac{d^2}{ds^2} \tilde{x}_1(s) \right| ds \\ &\leq K_1 \int_0^t (t-s) \left(|\tilde{x}_1(s)| + |\tilde{x}_2(s)| + \left\| \tilde{Q}(s) \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \right) ds, \end{aligned}$$

with K_1 constant dependent only on the cut-off parameter Λ and on the L^2 and Coulomb norms of f_1, f_2 . The same estimate trivially holds for $\tilde{x}_2(t)$. On the other hand,

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{Q}(t) \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} &\leq \int_0^t \left\| \frac{d}{ds} (Q - Q') \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} ds = \int_0^t \|F(Q) - F(Q')\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} ds \\ &\leq K_2 \int_0^t \left(|\tilde{x}_1(s)| + |\tilde{x}_2(s)| + \left\| \tilde{Q}(s) \right\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \right) ds, \end{aligned}$$

where here $f_i(|\cdot|) = f(|\cdot - x_i|)$ and $f'_i(|\cdot|) = f(|\cdot - x'_i|)$, $i = 1, 2$, and K_2 is again a constant dependent only on Λ and the norms of f_1, f_2 as K_1 .

Now,

$$\begin{aligned} h(t) &\leq \left(\int_0^t (K_2 + 2K_1(t-s)) \left(|\tilde{x}_1(s)| + |\tilde{x}_2(s)| + \|\tilde{Q}(s)\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)} \right) ds \right)^p \\ &\leq \left(\int_0^t (K_2 + 2K_1(t-s))^{p'} ds \right)^{\frac{p}{p'}} \left(\int_0^t h(s) ds \right), \end{aligned}$$

where p' is the conjugate exponent associated to p , which implies that $h(t) = 0$, $\forall t \in [0, \tau]$. \square

5 Global-in-time existence

We recall that the energy of the system described by (2.7) is given by

$$\begin{aligned} E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) &= \text{Tr}_{P^0} \left(D^0 Q(t) \right) - \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, \sum_{k=1}^2 z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|) \right) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)}, \rho_{Q(t)} \right) \\ &\quad - \frac{\alpha}{2} \int \int \frac{|Q(x, y)|^2}{|x - y|} dx dy + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 m_k |\dot{\bar{x}}_k(t)|^2 \\ &\quad + \alpha \int \int \frac{z_1 f_1(|x - \bar{x}_1(t)|) z_2 f_2(|y - \bar{x}_2(t)|)}{|x - y|} dx dy. \end{aligned}$$

It is easy to prove that $E^{(2)}$ is conserved along any solution of system (2.7). Indeed,

Proposition 2.10. *Let $(Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \in C^1([0, \tau], \mathcal{H}_\Lambda) \times (C^2([0, \tau], \mathbb{R}^3))^2$ be given by Theorem 2.7. Then $E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) = E^{(2)}(Q_I, \bar{x}_1^0, \bar{x}_2^0)$ for any $t \in [0, \tau]$.*

Proof.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) &= \text{Tr}_{P^0} \left(D^0 \dot{Q}(t) \right) + \alpha \mathcal{D} \left(\rho_{Q(t)} - \sum_{k=1}^2 z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|), \rho_{\dot{Q}(t)} \right) - \alpha \text{Tr} \left(\frac{Q(x, y)}{|x - y|} \dot{Q}(t) \right) \\ &\quad + \sum_{k=1}^2 \langle \dot{\bar{x}}_k(t), m_k \ddot{\bar{x}}_k(t) + \nabla_{\bar{x}_k} W_Q(t, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \rangle. \end{aligned}$$

We consequently obtain

$$\frac{d}{dt} E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) = \text{Tr}_{P^0} \left(D_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)} \dot{Q}(t) \right).$$

If we now insert Eq. (2.10), we get

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) &= -i \text{Tr}_{P^0} \left(D_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)} \left[D_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)} \left[D_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)} Q(t) \right] \right] \right) \\ &\quad - i \text{Tr}_{P^0} \left(D_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)} \left[V_{Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)}, P^0 \right] \right) \end{aligned}$$

and a simple computation shows that the two terms on the right-hand side are equal to zero. Thus the time derivative of the energy vanishes and our statement is proved. \square

Thanks to the conservation of energy of the system, we are now able to prove a global-in-time existence result for the unique solution of (2.7).

Corollary 2.11. *Let $(Q, \bar{x}_1, \bar{x}_2) \in C^1([0, \tau_{\max}], \mathcal{H}_\Lambda) \times (C^2([0, \tau_{\max}], \mathbb{R}^3))^2$ be the maximal solution provided by Theorem 2.7. If $0 \leq \alpha < \frac{4}{\pi}$, then $\tau_{\max} = +\infty$.*

Proof. By [HLS05b], we know the following inequality:

$$\begin{aligned} E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) + \frac{\alpha}{2} \sum_{k=1}^2 \|z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|)\|_{\mathcal{C}}^2 \\ \geq \left(1 - \alpha \frac{\pi}{4}\right) \text{Tr}_{P^0}(D^0 Q(t)) + \frac{\alpha}{2} \left\| \rho_{Q(t)} - \sum_{k=1}^2 z_k f_k(|\cdot - \bar{x}_k(t)|) \right\|_{\mathcal{C}}^2 \\ + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 m_k |\dot{\bar{x}}_k(t)|^2. \end{aligned}$$

By Proposition 2.10, $E^{(2)}(Q(t), \bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t)) = E^{(2)}(Q_I, \bar{x}_1^0, \bar{x}_2^0)$. Moreover, both $|\dot{\bar{x}}_k|$ and $\text{Tr}_{P^0}(D^0 Q(t))$ are bounded since $\|f(|\cdot - \bar{x}_k(t)|)\|_{\mathcal{C}} = \|f(|\cdot|)\|_{\mathcal{C}}$, $k = 1, 2$.

Finally we get that $|\bar{x}_k(t)|$ is bounded as well and $\|Q(t)\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)}$ stays bounded for $\alpha < \pi/4$ since $\text{Tr}_{P^0}(D^0 Q) \geq \|Q\|_{\mathfrak{S}_2(\mathfrak{H}_\Lambda)}$. Therefore, since τ_{\max} depends only on the norm of the initial datum and not on the initial datum itself, we get that $\tau_{\max} = +\infty$. \square

The free energy of Dirac's vacuum in purely magnetic fields

This chapter is a slightly modified version of [\[Mor24\]](#).

Abstract

The Dirac vacuum is a non-linear polarisable medium rather than an empty space. This non-linear behaviour starts to be significant for extremely large electromagnetic fields such as the magnetic field on the surface of certain neutron stars. Even though the null temperature case was deeply studied in the past decades, the problem at non-zero temperature needs to be better understood.

In this work, we present the first rigorous derivation of the one-loop effective magnetic Lagrangian at positive temperature, a non-linear functional describing the free energy of the Dirac vacuum in a classical magnetic field.

We start by properly defining the free energy functional using the Pauli-Villars regularisation technique in order to remove the worst ultraviolet divergences, which represent a well known issue of the theory. Then we study the limit of slowly varying classical magnetic fields. In this regime, we prove the convergence of this functional to the Euler-Heisenberg formula with thermal corrections, recovering the effective Lagrangian first derived by Dittrich [\[Dit79\]](#) in 1979.

Contents

1 Introduction	65
2 Derivation of the model and main results	68
3 Rigorous definition of the PV-regularised free energy functional	76
3.1 Integrable magnetic potentials: proof of the first part of Theorem 3.2	76
3.2 Gauge-invariant estimates	77
3.3 Proof of the second part of Theorem 3.2	85
4 The regime of slowly varying magnetic fields: proof of Theorem 3.3	85

1 Introduction

The non-linear polarisable nature of the vacuum in quantum field theory has been known for a long time [Dir34a; EK35; Wei36]. In this framework, the classical action is replaced by an effective action taking the quantum corrections into account while guaranteeing the validity of the principle of least action. In quantum electrodynamics, a standard way to get the effective action is by integrating out fermions in the path integral (see for instance [Sch13, Ch. 33]). In this manner, we obtain a functional of a classical electromagnetic field treated as an external one. In [Gra+13], the authors derive in a rigorous way the effective Lagrangian action for time-independent fields in the Coulomb gauge,

$$\mathcal{L}(\mathbf{A}) = -\mathcal{F}_{\text{vac}}(e\mathbf{A}) + e \int_{\mathbb{R}^3} (j_{\text{ext}} \cdot A(x) - \rho_{\text{ext}}(x) V(x)) dx + \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} (|E(x)|^2 - |B(x)|^2) dx,$$

where e is the elementary charge of an electron, $\mathbf{A} = (V, A)$ is a classical \mathbb{R}^4 -valued electromagnetic potential with corresponding field $\mathbf{F} = (E, B) = (-\nabla V, \text{curl}A)$, and ρ_{ext} and j_{ext} are given external charge and current densities. The corresponding Euler-Lagrange equations are the classical linear Maxwell equations with non-linear and non-local correction terms. These quantum corrections are negligible in the everyday regime and they start to be significant only for extremely large electromagnetic fields. The threshold above which the electromagnetic field starts behaving in a non-linear way is known as *Schwinger limit* and it is several orders of magnitude above what can be currently produced in a laboratory ($E_c \simeq 10^{18} \text{ V/m}$ and $B_c \simeq 10^9 \text{ T}$). To give an idea, such an electric field would accelerate a proton from rest to the maximum energy attained by protons at the Large Hydron Collider in only approximately 5 micrometers. However, the detection of these non-linear effects is still a very active area of experimental research [Bur+97; MTB06]. On the other hand, it is known that such a magnetic field strength is attained on the surface of magnetars, that is neutron stars with really large magnetic field, where these terms play an important role [BH01; DS03; MBS03]. In particular, the observation of one of these effects has been recently announced [Fan+17; Mig+16].

The vacuum energy \mathcal{F}_{vac} is a complicated non-local functional which suffers from ultraviolet divergences. In [Gra+13], the authors deal with them by using the Pauli-Villars regularisation method in order to give a rigorous definition of the functional. A simple and useful approximation, very well known in the physics literature, consists in replacing the complicated vacuum energy term \mathcal{F}_{vac} by a superposition of local independent problems, that is

$$\mathcal{F}_{\text{vac}} \simeq \int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{vac}}(eE(x), eB(x)) dx, \quad (3.1)$$

where $f_{\text{vac}}(eE, eB)$ is the energy per unit volume for a constant electromagnetic field $\mathbf{F} = (E, B)$. The function f_{vac} was first computed by Euler and Heisenberg [HE36] in 1936. Some alternative derivations were then presented by Weisskopf [Wei36] and Schwinger [Sch51], who introduced a largely renowned method in the physics literature known as *proper time method*. Since the integrand in the Euler-Heisenberg formula [GLS18, Formula 4] can have poles on the real line, a proper definition requires to shift the integration path to the complex plane by replacing the integral variable s by $s + i\eta$ and taking the limit $\eta \rightarrow 0$ [Sch51]. In this manner, the function f_{vac} gains an exponentially small non-zero imaginary part which was interpreted by Schwinger as the electron-positron pair production rate and explains the instability of the vacuum [DG00][GR09, Paragraph 7.3].

Nevertheless, in the case of a purely magnetic field, the Euler-Heisenberg formula is absolutely convergent and real, as expected. For this reason, this situation has been deeply studied in the physics literature [Con72; TE74; TE75; MS76] and the function f_{vac} can be simplified as follows:

$$f_{\text{vac}}(0, eB) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \frac{e^{-sm^2}}{s^3} \left(es|B| \coth(es|B|) - 1 - \frac{e^2 s^2 |B|^2}{3} \right) ds. \quad (3.2)$$

In the non-perturbative physical examples above, the fields exist in a thermal bath or in some non-equilibrium background which is very different from the vacuum. For this reason, the study of finite temperature effects in quantum field theory attracted the interest of many physicists in the past decades. In particular, several authors [KL72; Wei74; DJ74] considered what happens when a system of elementary particles described by a quantum field theory is heated. They found that symmetries which are spontaneously broken at zero temperature (such as those of the weak interactions) may be restored at sufficiently high temperatures, and calculated the critical temperature at which such a restoration takes place. To do this kind of calculation, one needs to know the Feynman rules for a field theory at finite temperature. For a non-gauge theory, these rules can be derived using well known methods [FW71]. However, for a gauge theory, a more powerful technique is needed to cope with several new problems that arise [Ber74]. In any case, the Feynman rules at finite temperature T consists in the zero temperature rules with the following formal replacements:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} &= \frac{i}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}, \\ p_0 &= i\omega_n, \\ (2\pi)^4 \delta^4(p_1 + p_2 + \dots) &= \frac{\beta}{i} (2\pi)^3 \delta(\omega_{n_1} + \omega_{n_2} + \dots) \delta^3(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \dots), \end{aligned} \quad (3.3)$$

where $\beta = 1/T$ and

$$\omega_n = \begin{cases} \frac{2n\pi i}{\beta} & \text{for bosons,} \\ \frac{(2n+1)\pi i}{\beta} & \text{for fermions.} \end{cases}$$

In 1979, Dittrich studied thermal effects in quantum electrodynamics. In particular, in [Dit79], he calculates the one-loop effective potential at finite temperature for scalar and spinor QED in the presence of a constant magnetic field, namely the Euler-Heisenberg Lagrangian at positive temperature. In his work, he shows that the one-loop effective potential at finite temperature represents - in the language of thermodynamics - the contribution of the vacuum energy to the total free energy in presence of an external constant field. By employing the proper time method and using the replacements (3.3), the following Lagrangian at finite temperature is derived:

$$\mathcal{L}(B, T) = \frac{(\pi i)^{1/2}}{4\pi^2 \beta} \int_0^\infty e^{-ism^2} (esB) \cot(esB) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{is\omega_n^2} \frac{ds}{s^{5/2}},$$

which is obviously an ill-defined function. Notice that the cotangent here can be explained by a simple rotation of the integral domain in the imaginary plane as it will be discussed later. This is a standard technique in the physics literature allowing to avoid the poles of the integrand function. This explains also why the imaginary exponential appears in the

integral above. After some further manipulations, this formula can be expressed as

$$\mathcal{L}(B, T) = \mathcal{L}^0(B) + \mathcal{L}^T(B, T), \quad (3.4)$$

where \mathcal{L}^0 is the Euler-Heisenberg Lagrangian at null temperature given by (3.2) and the term \mathcal{L}^T , containing all the thermal effects, is expressed as follows:

$$\mathcal{L}^T(B, T) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty e^{-ism^2} (esB) \cot(esB) \sum_{n \neq 0} (-1)^n e^{i\frac{n^2\beta^2}{4s}} \frac{ds}{s^3}. \quad (3.5)$$

This result can be related to well known findings of statistical thermodynamics, by studying the case of massless fermions (and bosons). In order to do so, setting $B = 0$ and $m = 0$ in \mathcal{L}^T yields

$$\mathcal{L}_F(0, T) = \frac{2}{3} \frac{7}{120} \pi^2 k^4 T^4,$$

where \mathcal{L}_F stands for the fermionic choice of ω_n and k is the Boltzmann constant. Thanks to the following formula:

$$\int_0^\infty \frac{x^{2n-1}}{e^x + 1} dx = (1 - 2^{1-2n}) (2\pi)^{2n} \frac{|B_{2n}|}{4n},$$

where B_n are the Bernoulli numbers, one can finally get

$$\mathcal{L}_F(0, T) = \frac{2}{3} \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^{x/kT} + 1} dx,$$

which is the correct Fermi-Dirac distribution, confirming the coherence of these calculations within the statistical framework. Later, the thermal effective action for a constant magnetic field [Dit79; EPS93] has been generalised to arbitrary constant electromagnetic fields in [ES95]. In other words, here the one-loop effective action for a constant electromagnetic field [Sch51] has been generalised to finite temperature and chemical potential.

It is now clear that the calculation of the effective action at positive temperature has been an interesting physical question for some decades, particularly because the imaginary part of the effective action is expected to give the vacuum decay rate and one would like to understand the influence of the temperature on this rate. There have been several attempts to generalise Schwinger's proper time method to the finite temperature case in order to determine the temperature dependent effective actions, leading to conflicting results in the physics literature. The subtleties behind these results have to do with the imposition of the anti-periodicity condition required at positive temperature as well as on the finite temperature formalism used to carry out the calculation. We refer the interested reader to [Das11], based on the previous papers [DF09; DF10; DF11], for more details about the argument. We also refer the reader to [DG00, Chapter 3.5] for a complete review about QED at finite temperature.

The aim of this paper is first of all to properly define the vacuum free energy $\mathcal{F}_{\text{vac}}^T$ of a quantised Dirac field at positive temperature T . Again, this quantity suffers from divergences in the high energy regime which need to be regularised. In order to do so, we use the Pauli-Villars technique as in [Gra+13].

In Section 2, we derive the model starting from the Hamiltonian of a second-quantised fermionic field in a given electromagnetic potential $\mathbf{A} = (V, A)$. After obtaining the vacuum energy, we then consider the associated vacuum free energy by introducing an entropy term. The whole framework is discussed in detail and main results are presented.

In Section 3, the first part of Theorem 3.2 stating the well-posedness of the vacuum free energy functional is proved. Then, thanks to additional gauge-invariant estimates, we give a proof of the second part of the theorem providing the main properties of the addressed functional and allowing us to extend it to the most natural function space for this problem. In particular, we find replacements similar to (3.3) which need to be applied to the null temperature setting [Gra+13; GLS18] in order to get the right calculations for the non-zero temperature case. Due to these prescriptions, the integration by parts with respect to the discretised variable does not hold anymore adding some additional technical difficulties to this problem. Partly for this reason, we restrict our study to the purely magnetic case. Moreover, Lemma 3.5 shows that we cannot expect an effect similar to the one shown in [HLS08] for the reduced Bogoliubov-Dirac-Fock (BDF) model, where the authors prove that the thermal effects make the particles rearrange in the polarised Dirac sea in order to completely screen the external potential. This is a classical phenomenon in the field of non-relativistic fermionic plasma physics, known as *Debye screening*.

Later, in Section 4, we provide the first rigorous derivation of the purely magnetic Euler-Heisenberg formula for the vacuum free energy at positive temperature, in the regime where B is slowly varying in space. In this limit, we prove the convergence of the free energy to the null temperature Euler-Heisenberg formula corrected by thermal contributions, recovering a Pauli-Villars regularised effective Lagrangian which coincides with the one first derived by Dittrich [Dit79] in 1979 (see (3.4) and (3.5)), up to some standard mathematical manipulations needed so as to give a rigorous meaning to this object, as it will be discussed in this section. Even though the null temperature case has been rigorously studied in [GLS18], to the best of our knowledge the non-zero temperature problem has been treated only in the physics literature. More specifically, we consider a magnetic field of the form $B(\varepsilon x)$ and look at the limit $\varepsilon \rightarrow 0$. Notice that in this context we get a strong magnetic potential given by $A_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-1}A(\varepsilon x)$. Nevertheless, this is not a source of additional difficulties from a spectral point of view (see Lemma 3.1). Indeed, briefly speaking, the presence of a purely magnetic field ensures us to keep the spectrum of the Dirac operator far apart from zero without adding any additional hypothesis on the size of the potential (as we would expect to do if an electric potential was turned on). In this regime, as stated in Theorem 3.3 below, we recover an asymptotic Euler-Heisenberg formula for the vacuum free energy of the following form:

$$\mathcal{F}_{\text{vac}}^T(0, eA_\varepsilon) \underset{\varepsilon \rightarrow 0}{\sim} \int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{vac}}^T(0, eB(\varepsilon x)) dx = \varepsilon^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{vac}}^T(0, eB(x)) dx,$$

where f_{vac}^T is a suitable function describing the free energy per unit volume.

2 Derivation of the model and main results

We want to define the free energy of the Dirac vacuum at positive temperature. In order to do so, we first consider a fermionic second-quantised field placed in a given electromagnetic potential $\mathbf{A} = (V, A)$. The potential is kept fixed and we look for the ground state energy of the Dirac field in the given \mathbf{A} . The Hamiltonian of the field reads

$$\mathbb{H}^{e\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left(\Psi^*(x) D_m^{e\mathbf{A}} \Psi(x) - \Psi(x) D_m^{e\mathbf{A}} \Psi^*(x) \right) dx, \quad (3.6)$$

where $\Psi(x)$ is the second-quantised field operator which can physically be interpreted as the annihilation of an electron at x and mathematically is defined by means of the

following anticommutation relation:

$$\Psi^*(x)_\sigma \Psi(y)_\nu + \Psi(y)_\nu \Psi^*(x)_\sigma = 2\delta_{\sigma,\nu}\delta(x-y).$$

Here $1 \leq \sigma, \nu \leq 4$ are the spin variables and $\Psi(x)_\sigma$ is an operator-valued distribution. The Hamiltonian \mathbb{H}^{eA} formally acts on the fermionic Fock space,

$$\mathcal{F} = \mathbb{C} \oplus \bigoplus_{N \geq 1} \bigwedge^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4),$$

and has the interesting property of being charge conjugation invariant,

$$C\mathbb{H}^{eA}C^{-1} = \mathbb{H}^{-eA}$$

(where C is the charge-conjugation operator in Fock space as defined in [Tha92, Formula (1.81)]), when the integrand in (3.6) is interpreted as follows:

$$\begin{aligned} & \Psi^*(x) D_m^{eA} \Psi(x) - \Psi(x) D_m^{eA} \Psi^*(x) \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^4 \left(\Psi^*(x)_\mu \left(D_m^{eA} \right)_{\mu, \nu} \Psi(x)_\nu - \Psi(x)_\mu \left(D_m^{eA} \right)_{\mu, \nu} \Psi^*(x)_\nu \right). \end{aligned}$$

In formula (3.6),

$$D_m^{eA} = \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla - eA) + eV + m\beta$$

is the electromagnetic Dirac operator acting on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. We work in a system of units such that the speed of light and Planck's reduced constant are both set equal to one, $c = \hbar = 1$. The four Dirac matrices $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ and β are given by

$$\alpha_k = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{bmatrix},$$

with Pauli matrices σ_1, σ_2 and σ_3 defined as

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

The spectrum of the free Dirac operator is not bounded from below [Tha92]. Indeed,

$$\sigma(D_m^0) = (-\infty, -m] \cup [m, \infty).$$

This led Dirac to postulate that the vacuum is filled with infinitely many virtual particles occupying the negative energy states (*Dirac sea*) [Dir30; Dir34a; Dir34b]. As a consequence, a real free electron cannot be in a negative state due to the Pauli exclusion principle. Moreover, Dirac conjectured the existence of "holes" in the Dirac sea interpreted as positrons, having a positive charge and a positive energy. Dirac also predicted the phenomenon of vacuum polarisation: in the case of an external electric field, the virtual electrons align their charges with the field direction and the vacuum obtains a non-constant density of charge. Actually the polarised vacuum modifies the electrostatic field and the virtual electrons react to the corrected field. We refer the reader to [ELS08] for a detailed review about the difficulties arising from the negative part of the spectrum of the free Dirac operator.

Returning to the electromagnetic Dirac operator, it is natural then to introduce the following Coulomb-gauge homogeneous Sobolev space:

$$\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3) = \left\{ \mathbf{A} = (V, A) \in L^6(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4) \mid \text{div} A = 0 \right. \\ \left. \text{and } \mathbf{F} = (-\nabla V, \text{curl} A) \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6) \right\},$$

endowed with its norm

$$\|\mathbf{A}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\nabla V\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\text{curl} A\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\mathbf{F}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2.$$

The equation $\text{div} A = 0$ should be interpreted in a distributional sense. The assumption on \mathbf{F} being in $L^2(\mathbb{R}^3)$ trivially means that the electromagnetic field has a finite energy,

$$\int_{\mathbb{R}^3} |E|^2 + |B|^2 < \infty.$$

The proof of the following lemma, which recalls some spectral properties of the electromagnetic Dirac operator $D_m^{e\mathbf{A}}$, can be found in [Gra+13, Lemma 2.1]:

Lemma 3.1. *Let $m > 0$ and $\mathbf{A} \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$.*

(i) *The operator $D_m^{e\mathbf{A}}$ is self-adjoint on $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ and its essential spectrum is*

$$\sigma_{\text{ess}}(D_m^{e\mathbf{A}}) = (-\infty, -m] \cup [m, \infty).$$

(ii) *There exists a universal constant C such that, if $\|\mathbf{A}\|_{\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)} \leq \eta\sqrt{m}$, for some number $\eta < 1/C$, then*

$$\sigma(D_m^{e\mathbf{A}}) \cap (-m(1 - C\eta), (1 - C\eta)m) = \emptyset.$$

(iii) *Finally, if $V = 0$, then $\sigma(D_m^{e\mathbf{A}}) \cap (-m, m) = \emptyset$.*

The expectation value of the energy in any state in Fock space can be expressed as

$$\langle \mathbb{H}^{e\mathbf{A}} \rangle = \text{Tr} \left[D_m^{e\mathbf{A}} \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) \right] = E(\gamma), \quad (3.7)$$

where γ is the one-particle density matrix associated to a given state, namely

$$\gamma(x, y)_{\sigma, \nu} = \langle \Psi^*(x)_{\sigma} \Psi(y)_{\nu} \rangle.$$

The renormalised density matrix in (3.7) is a consequence of charge-conjugation invariance. The interested reader can find more details in [HLS07]. Since electrons are fermions, they obey the Pauli exclusion principle, which implies that γ has to satisfy $0 \leq \gamma \leq 1$ on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$. On the other hand, any operator γ verifying $0 \leq \gamma \leq 1$ formally arises from one state in Fock space. Since the energy depends on the state of the electrons only through the density matrix γ , we can reformulate our problem by focusing on the simpler operator γ and the corresponding energy (3.7).

Recall that we are interested in finding the ground state of the vacuum at positive temperature T , therefore we need to consider the following free energy:

$$F(\gamma) = E(\gamma) - T \text{Tr} [S(\gamma)], \quad (3.8)$$

where

$$S(x) = -x \log x - (1-x) \log(1-x),$$

and the minimisation of the free energy functional with respect to γ has to be addressed. For atoms and molecules, we should add a charge constraint of the following form:

$$\text{Tr} \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) = N.$$

In this section, we set the electric potential V to be equal to 0 and focus on the derivation of Dirac's vacuum free energy in an external magnetic field at positive temperature T . Thus, we have not any other constraint than $0 \leq \gamma \leq 1$. The reason of this choice will be clearer in the following sections, but essentially working with a magnetic Dirac operator ensures us to keep the spectrum far away from 0 without adding some additional hypothesis on the size of the potential and allowing us to localise the energy to sets of fixed size. By [GKS23, Lemma 1.1], we know that the only critical point γ^* of functional (3.8), which is also the unique minimiser by convexity, is given by

$$\gamma^* = \frac{1}{1 + e^{D_m^{eA}/T}} = \frac{e^{-D_m^{eA}/2T}}{2 \cosh(D_m^{eA}/2T)}, \text{ hence } 1 - \gamma^* = \frac{1}{1 + e^{-D_m^{eA}/T}} = \frac{e^{D_m^{eA}/2T}}{2 \cosh(D_m^{eA}/2T)}.$$

Then, the corresponding value of the free energy formally is

$$\begin{aligned} F(\gamma^*) &= \text{Tr} \left[D_m^{eA} \left(\gamma^* - \frac{1}{2} \right) \right] - T \text{Tr} [S(\gamma^*)] \\ &= -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^{eA}}{2} \right) \right] = \mathcal{F}(eA, \beta). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Of course this free energy is infinite except if our model is settled in a box with an ultraviolet cut-off [HLS07]. In order to give a clear mathematical meaning to (3.9), we proceed as follows. First, we can subtract the (infinite) free energy of the free Dirac sea and define the relative free energy as

$$\mathcal{F}_{\text{rel}}(eA, \beta) = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^0}{2} \right) - \log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^{eA}}{2} \right) \right]. \quad (3.10)$$

By subtracting an infinite constant, we do not formally change the variational problem that we are interested in, so we also do not change the resulting equations. However, the functional (3.10) is not well defined yet because of the well known ultraviolet divergences of this theory. Indeed, the operator $\log \left(2 \cosh \left(\beta D_m^0 / 2 \right) \right) - \log \left(2 \cosh \left(\beta D_m^{eA} / 2 \right) \right)$ is not trace class as long as $A \neq 0$. This can formally be seen by expanding the trace in a power series of eA . As we will see later, the first order term vanishes and the second order term is infinite due to ultraviolet divergences. Moreover, the formal higher order terms cannot prevent this ultraviolet divergence.

It is then clear that a UV cut-off has to be imposed. The choice of this regularisation is extremely important. As shown below, in the expansion of (3.10) as a power series of eA , several terms vanish due to gauge invariance. This is an extra reason to preserve the gauge symmetry, in addition to well known physical motivations. In [GLS09], the authors studied two ways of dealing with UV divergences in the purely electrostatic case, but both of them would not work here because of their lack of gauge symmetry.

Here, we will use the regularisation technique introduced by Pauli and Villars [PV49]

in 1949. Of course, this is not the only possible choice when gauge invariance has to be conserved (see for instance [Lei75] for an alternative approach). The Pauli-Villars method consists in introducing J fictitious particles into the model with very high masses m_1, \dots, m_J playing the role of ultraviolet cut-offs. Indeed, note that m has the dimension of a momentum since in our system of units $\hbar = c = 1$. The only role of these additional particles is to regularise the model at high energies and they have no physical meaning. Indeed, these particles being really massive, they do not affect the low energy regime. In our framework, the Pauli-Villars method consists in introducing the following energy functional:

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta) = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^J c_j \left(\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} \right) - \log \left(2 \cosh \frac{\beta D_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right) \right]. \quad (3.11)$$

Here, $m_0 = m$ and $c_0 = 1$, and the coefficients c_j and m_j are chosen such that

$$\sum_{j=0}^J c_j = \sum_{j=0}^J c_j m_j^2 = 0. \quad (3.12)$$

It is well known in the physics literature [PV49; GR09; BD65] that only two auxiliary fields are necessary to fulfill these conditions, hence we shall take $J = 2$ in the rest of this work. In this case, condition (3.12) is equivalent to

$$c_1 = \frac{m_0^2 - m_2^2}{m_2^2 - m_1^2} \quad \text{and} \quad c_2 = \frac{m_1^2 - m_0^2}{m_2^2 - m_1^2}.$$

We shall always assume that $m_0 < m_1 < m_2$, which implies that $c_1 < 0$ and $c_2 > 0$. The role of the constraint (3.12) is to remove the worst linear ultraviolet divergences. Indeed, the Pauli-Villars regularisation does not avoid a logarithmic divergence when $m_1, m_2 \rightarrow \infty$. In order to better understand this, we can define the averaged ultraviolet cut-off Λ as

$$\log(\Lambda^2) = - \sum_{j=0}^2 c_j \log(m_j^2). \quad (3.13)$$

Of course, once the value of Λ is fixed, we cannot uniquely determine m_1, m_2 . Practically speaking, we usually choose the masses as functions of Λ such that the Pauli-Villars coefficients c_1, c_2 stay bounded when $\Lambda \rightarrow \infty$. As already mentioned, the logarithmic divergence in the averaged cut-off Λ can explicitly be seen in the second order term in the expansion which will be studied in detail in the sequel of this work (see Section 3.2). A renormalisation of the elementary charge e is necessary in order to remove this remaining divergence, but we will not address this problem here.

Now, in order to simplify our calculations, we rewrite the Pauli-Villars-regularised free energy functional in an integral form. In order to do so, we derive (3.11) with respect to β by getting

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta)) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^{eA} \tanh \frac{\beta D_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right],$$

which implies

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(eA, \beta) = \frac{1}{2\beta} \int_0^\beta \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{bD_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^{eA} \tanh \frac{bD_{m_j}^{eA}}{2} \right) \right] db. \quad (3.14)$$

Notice that thanks to conditions (3.12) the value of \mathcal{F}_{PV} goes to zero as β goes to zero. Let us remark that in the following the elementary charge e will be set to be equal to 1.

We can now state one of the main results of this paper stating the well-posedness of the PV-regularised free energy functional \mathcal{F}_{PV} and giving its properties. The proof of this theorem will be given in Section 3.

Theorem 3.2. *Assume that c_j and m_j satisfy*

$$c_0 = 1, \quad m_2 > m_1 > m_0 > 0 \quad \text{and} \quad \sum_{j=0}^2 c_j = \sum_{j=0}^2 c_j m_j^2 = 0.$$

Let

$$T_A(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^A \tanh \frac{\beta D_{m_j}^A}{2} \right).$$

- (i) *For any $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$, the operator $T_A(\beta)$ is trace class on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, well defined with respect to β and bounded in a neighbourhood of $\beta = 0$. In particular, $\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta)$ is well defined in this case by*

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_A(b)) db.$$

- (ii) *Let $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. We have*

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) = \mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) + \mathcal{R}(A, \beta),$$

where $B = \text{curl}A$. The functional \mathcal{R} is of class C^∞ on $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ and there exists a universal constant $\kappa = \kappa(\beta)$ such that

$$|\mathcal{R}(A, \beta)| \leq \kappa \left(\left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j} \right) \|B\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^4 + \left(\sum_{j=0}^2 \frac{|c_j|}{m_j^2} \right) \|B\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^6 \right). \quad (3.15)$$

The functional $\mathcal{F}_{\text{PV},2}$ is the nonnegative and bounded quadratic form on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ given by

$$\mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \left(M^0(q) + M^T(q, \beta) \right) |\widehat{B}(q)|^2 dq,$$

with

$$M^0(q) = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j \log \left(m_j^2 + u(1-u)q^2 \right) u(1-u) du$$

and

$$M^T(q, \beta) = -\frac{8}{\pi} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left[\frac{1}{1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}} + \frac{1}{X_j(\beta, u, q) \cosh t} (2 \log 2 - \log \left((e^{X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) (e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) \right)) \right] dt u (1 - u) du,$$

where $X_j(b, u, q) = b\sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2}$ for $j = 0, 1, 2$.

Indeed, the function M^0 is well defined and positive on \mathbb{R}^3 , and satisfies

$$0 < M^0(q) \leq M^0(0) = \frac{2 \log \Lambda}{3\pi}, \quad (3.16)$$

where Λ is defined by (3.13). Moreover, M^T is well defined, bounded and such that

$$M^0(q) + M^T(q, \beta) \geq 0. \quad (3.17)$$

In particular, the functional \mathcal{F}_{PV} can be uniquely extended to a continuous mapping on $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$.

The function M^0 describes the linear response of the Dirac sea at zero temperature and is very well known in the physics literature [GR09, Eq. (5.39)]. From a mathematical point of view, it has been proved in [Gra+13] that

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left(\frac{2 \log \Lambda}{3\pi} - M^0(q) \right) = U(q) := \frac{|q|^2}{4\pi} \int_0^1 \frac{z^2 - z^4/3}{1 + |q|^2(1-z^2)/4} dz,$$

where the function U in the right-hand side was first computed by Serber [Ser35] and Uehling [Ueh35]. The same function appears in previous mathematical works studying the purely electrostatic case [HS03; HLS05b; GLS11]. As already mentioned, the Pauli-Villars regularisation allows us to remove only the worst linear ultraviolet divergences. Indeed, the second order term is still logarithmically divergent in the high frequencies domain because of M^0 , as shown in (3.16). On the other hand, M^T is the contribution at finite temperature T to the linear response of Dirac's vacuum. Notice that it is convergent without the need to be regularised. In particular, the decomposition into the null temperature contribution and the thermal one seems to show that the UV divergence only comes from the zero temperature term. It would therefore be interesting to prove that the renormalisation formula in our case coincides with the one at vanishing temperature. Estimate (3.17) guarantees \mathcal{F}_{PV} to be a well defined free energy functional from both a mathematical and a physical point of view. For all of these reasons, Theorem 3.2 is the equivalent of [Gra+13, Theorem 2.1] at positive temperature T and will be discussed much more in detail in Section 3.

The boundedness of the second order term $\mathcal{F}_{\text{PV},2}$ and of the remainder \mathcal{R} allows us to uniquely extend the PV-regularised free energy functional to the whole space $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. This property is important for the second main result of this work, which derives an Euler-Heisenberg formula for the vacuum free energy starting from the PV-regularised free energy functional, in the regime of slowly varying purely magnetic fields. Thus, we consider a scaled magnetic field of the form $B_\varepsilon(x) = B(\varepsilon x)$, with a given $B = \text{curl} A \in L^2(\mathbb{R}^3)$ and $A \in \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. The following theorem requires a bit more regularity:

Theorem 3.3. *Let $B \in C^0(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ be such that $\operatorname{div} B = 0$,*

$$B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad \nabla B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^6(\mathbb{R}^3), \quad (3.18)$$

and let A be the associated magnetic potential in $\dot{H}_{\operatorname{div}}^1(\mathbb{R}^3)$. Let $A_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-1}A(\varepsilon x)$. Then,

$$\varepsilon^3 \mathcal{F}_{\text{PV}}(A_\varepsilon, \beta) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(f_{\text{PV}}^0(|B(x)|) + f_{\text{PV}}^T(|B(x)|, \beta) \right) dx + O(\varepsilon),$$

where

$$f_{\text{PV}}^0(a) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (sa \coth(sa) - 1) \frac{ds}{s^3}$$

and

$$f_{\text{PV}}^T(a, \beta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} (sa \coth(sa) - 1) \sum_{n=1}^\infty (-1)^n e^{-\frac{\beta^2 n^2}{4s}} \frac{ds}{s^3}. \quad (3.19)$$

The function f_{PV}^0 is the well known Euler-Heisenberg energy function at null temperature, which has been introduced for the first time in [HE36]. Actually, the authors there derive a concave-decreasing and negative function given by (3.2) and diverging faster than $|B|^2$ at infinity. For this reason, the total energy of the system, given in the limit by an effective local Lagrangian, is unbounded from below and the model is unstable. Then the same function has been mathematically studied in the same regime of slowly varying purely magnetic fields in [GLS18], where the authors derive a non-negative Euler-Heisenberg energy function which guarantees the corresponding model to be stable. Moreover, they find out that the instability of the previous Lagrangian was due to the charge renormalisation [GLS18, Section 2.3]. On the other hand, the function f_{PV}^T is the non-zero temperature contribution to the total Euler-Heisenberg energy function. To our knowledge, this is the first rigorous derivation of this term, which can be found in the physics literature in [Dit79] and [DG00, Equation (3.162)]. Notice that the Pauli-Villars sum is not really necessary to make the integral convergent. It seems rather to come from the regularisation of the zero temperature contribution, as already explained above. Notice that actually Eq. (3.19) is slightly different from Eq. (3.5) appearing in [Dit79]. Indeed, the thermal Euler-Heisenberg formula found in the physics literature is not a well defined object because of the well known ultraviolet divergences in QED. As previously explained, here we deal with this issue by using the Pauli-Villars regularisation technique. In our framework, it corresponds to the appearance of the sum in j and consequently of the masses m_j 's. Moreover, the cotangent in (3.5) makes the integral obviously ill-defined due to its infinitely many poles. The concurrent presence of the imaginary exponential suggests to rotate the integration path in order to replace the cotangent by the hyperbolic cotangent by getting a formula closer to ours. This procedure is standard in the physics literature, but of course should be carefully justified from a mathematical point of view. The proof of Theorem 3.3 can be found in Section 4.

3 Rigorous definition of the PV-regularised free energy functional

3.1 Integrable magnetic potentials: proof of the first part of Theorem 3.2

Our starting point is the following formula:

$$x \tanh x = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{4x^2}{(2k-1)^2 \pi^2 + 4x^2} \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(2 - \frac{i(2k-1)\pi}{2x + i(2k-1)\pi} + \frac{i(2k-1)\pi}{2x - i(2k-1)\pi} \right). \quad (3.21)$$

When S is a self-adjoint operator on $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4)$, with domain $\text{Dom}(S)$, it follows from (3.21) using standard functional calculus [RS72] that the hyperbolic tangent $\tanh S$ of S satisfies

$$S \tanh S = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(2 - \frac{i(2k-1)\pi}{2S + i(2k-1)\pi} + \frac{i(2k-1)\pi}{2S - i(2k-1)\pi} \right).$$

Notice that this series is convergent when seen as an operator from $\text{Dom}(S^2)$ to the ambient Hilbert space. Indeed,

$$\left\| \frac{4S^2}{4S^2 + (2k-1)^2 \pi^2} \right\|_{D(S^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4)} \leq \min \left\{ 1, ((2k-1)\pi)^{-2} \|4S^2\|_{D(S^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^4)} \right\}.$$

Since the domain of $(D_{m_j}^0)^2$ and $(D_{m_j}^A)^2$ are both equal to $H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, we can write

$$T_A(\beta) = \frac{1}{2\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A - i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} + \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 - i\omega(k, \beta)} \right), \quad (3.22)$$

on $H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$, where

$$\omega(k, \beta) = \frac{(2k-1)\pi}{\beta}.$$

Lemma 3.1 guarantees us that 0 is not an eigenvalue of the magnetic Dirac operator D_m^A . In any case, this would not have been a problem since $\omega(k, \beta) \neq 0, \forall k \in \mathbb{Z}$.

In order to prove the theorem, we want to prove that the series in the right-hand side of (3.22) defines a trace class operator whose Schatten norm can be estimated as follows:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \left\| \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A - i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} + \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 - i\omega(k, \beta)} \right) \right\|_{\mathfrak{S}_1} = O(\beta),$$

as $\beta \rightarrow 0$, which can be proved when $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$. Indeed, it is not important that $\text{div } A = 0$ for this result and consequently we do not require A to be in

$\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$.

In order to do so, we just need to derive estimates in Schatten spaces of the operator

$$\mathcal{R}(\omega(k, \beta), A) = \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A - i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} + \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 - i\omega(k, \beta)} \right),$$

which we can then sum with respect to $k \in \mathbb{Z}$. To this end, by using the resolvent formula

$$\frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} - \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} = \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} (\boldsymbol{\alpha} \cdot A) \frac{1}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)}$$

and iterating it six times, we get

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\omega(k, \beta), A) &= \sum_{n=1}^5 (R_n(\omega(k, \beta), A) + R_n(-\omega(k, \beta), A)) \\ &\quad + (R'_6(\omega(k, \beta), A) + R'_6(-\omega(k, \beta), A))), \end{aligned}$$

with

$$R_n(\omega(k, \beta), A) = \sum_{j=0}^2 c_j \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} \left((\boldsymbol{\alpha} \cdot A) \frac{1}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} \right)^n \quad (3.23)$$

and

$$R'_6(\omega(k, \beta), A) = \sum_{j=0}^2 c_j \frac{i\omega(k, \beta)}{D_{m_j}^A + i\omega(k, \beta)} \left((\boldsymbol{\alpha} \cdot A) \frac{1}{D_{m_j}^0 + i\omega(k, \beta)} \right)^6. \quad (3.24)$$

Basically, by replacing the integral with respect to ω by the series with respect to k , the same proof as in [Gra+13, Theorem 2.1] holds giving that

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(\sum_{j=1}^5 \| (R_n(\omega(k, \beta), A) + R_n(-\omega(k, \beta), A)) \|_{\mathfrak{S}_1} \right. \\ \left. + \| (R'_6(\omega(k, \beta), A) + R'_6(-\omega(k, \beta), A)) \|_{\mathfrak{S}_1} \right) = O(\beta), \end{aligned}$$

as $\beta \rightarrow 0$. □

3.2 Gauge-invariant estimates

In Section 3.1, we showed that the operator

$$T_A(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^2 c_j \left(D_{m_j}^0 \tanh \frac{\beta D_{m_j}^0}{2} - D_{m_j}^A \tanh \frac{\beta D_{m_j}^A}{2} \right)$$

is trace class when the magnetic potential A decays fast enough, namely when $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$. More precisely, in the proof of the first part of Theorem 3.2,

we write

$$T_A(\beta) = \sum_{n=1}^5 T_n(A, \beta) + T'_6(A, \beta) = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=1}^5 \sum_{k \in \mathbb{Z}} (R_n(\omega(k, \beta), A) + R_n(-\omega(k, \beta), A)) \\ + \frac{1}{2\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}} (R'_6(\omega(k, \beta), A) + R'_6(-\omega(k, \beta), A)),$$

with R_n, R'_6 given by (3.23) and (3.24), and we prove that the operators $T_n(A, \beta)$ and $T'_6(A, \beta)$ are trace class. Nevertheless, our estimates involve non gauge-invariant quantities (some L^p norms of A) and they require that A decays fast enough at infinity. We are interested in estimates which involve only the norm $\|\text{curl}A\|_{L^2}$. Notice that in the previous section it was not essential that $\text{div}A = 0$. We will need this hypothesis in the sequel of this work (see Lemma 3.5 below).

First of all, let us state the following lemma which says that the trace of the odd order operators $T_1(A, \beta)$, $T_3(A, \beta)$ and $T_5(A, \beta)$ vanishes. This is a consequence of the charge-conjugation invariance which is usually known as Furry's theorem in the physics literature (see [Fur37] and [GR09, Sec. 4.1]).

Lemma 3.4. *For $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ and $n = 1, 3, 5$, we have*

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_n(A, b)) db \\ = \frac{1}{2\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \text{Tr}(R_n(\omega(k, b), A) + R_n(-\omega(k, b), A)) \frac{db}{b} = 0.$$

Proof. The proof is the same as in [Gra+13, Lemma 4.1]. \square

We now compute exactly the second order term $\mathcal{F}_{\text{PV},2}$ associated to the term $T_2(A, \beta)$ appearing in the decomposition of $T_A(\beta)$, assuming that $A \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ and $\text{div}A = 0$.

Lemma 3.5. *For $A \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$, we have*

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_2(A, b)) db = \frac{1}{8\pi} \int_{\mathbb{R}^3} (M^0(q) + M^T(q, \beta)) |\widehat{B}(q)|^2 dq = \mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta), \quad (3.25)$$

with

$$M^0(q) = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j \log(m_j^2 + u(1-u)q^2) u(1-u) du \quad (3.26)$$

and

$$M^T(q, \beta) = -\frac{8}{\pi} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left[\frac{1}{1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}} + \frac{1}{X_j(\beta, u, q) \cosh t} (2 \log 2 \right. \\ \left. - \log \left(\left(e^{X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1 \right) \left(e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1 \right) \right) \right] dt u(1-u) du, \quad (3.27)$$

where $X_j(b, u, q) = b\sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2}$ for $j = 0, 1, 2$.

The function M^0 in formula (3.25) is the dielectric response of Dirac's vacuum at zero temperature which has already been rigorously computed in [Gra+13, Formula (2.21)] and is well known in the physics literature [GR09, Eq. (5.39)]. On the other hand, M^T

defined in (3.27) is the contribution at finite temperature T to the dielectric response of Dirac's vacuum. Notice that the integral with respect to t in (3.27) is perfectly defined and converges for $q = 0$, namely M^T is bounded in a neighborhood of $q = 0$. This means that we cannot expect an effect similar to the one shown in [HLS08] for the reduced BDF model, where the authors prove that due to the positive temperature the particles in the polarised Dirac sea rearrange themselves so as to completely screen the external potential. As already mentioned, this phenomenon is known as Debye screening in non-relativistic fermionic plasma physics. After all, this could be explained by the nature of the magnetic field which basically acts on charged particles by confining them in a space region rather than attracting or repelling them.

Proof. First of all, in order to include a finite temperature, notice that we simply have to make the following formal replacements:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} d\omega \rightarrow \frac{1}{2\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}},$$

$$\omega \in \mathbb{R} \rightarrow \omega(k, \beta) = \frac{(2k-1)\pi}{\beta}, \quad k \in \mathbb{Z},$$

where $\beta = 1/T \in (0, \infty)$, and then to consider the averaged primitive function with respect to β of each term in the expansion. By keeping this prescription in mind, the same computations as in the proof of [Gra+13, Lemma 4.2] yields

$$\text{Tr}(T_2(A, \beta)) = \int_{\mathbb{R}^3} G(q, \beta) |\widehat{A}(q)|^2 dq,$$

with

$$G(q, \beta) = \frac{1}{\beta\pi^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sum_{j=0}^2 c_j \frac{(p \cdot q) \omega(k, \beta)^2}{(p^2 + m_j^2 + \omega(k, \beta)^2)^2 ((p-q)^2 + m_j^2 + \omega(k, \beta)^2)} dp.$$

We then use the identity (see [GR09, Chap. 5])

$$\frac{1}{a^2 b} = \int_0^1 \left(\int_0^\infty s^2 e^{-s(ua+(1-u)b)} ds \right) u du$$

to rewrite

$$G(q, \beta) = \frac{1}{\beta\pi^3} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + (1-u)q^2)} \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-s\omega(k, \beta)^2} \omega(k, \beta)^2 \right) \times \int_{\mathbb{R}^3} (p \cdot q) e^{-s(p^2 - 2(1-u)p \cdot q)} dp s^2 ds u du.$$

This is justified by conditions (3.12) which allow us to apply Fubini's theorem to recombine the integrals. Since

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-s\omega(k, \beta)^2} \omega(k, \beta)^2 = \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{-s \frac{4\pi^2}{\beta^2} (k - \frac{1}{2})^2} \frac{4\pi^2}{\beta^2} \left(k - \frac{1}{2} \right)^2 = -\frac{d}{ds} \theta_2 \left(0, \frac{4\pi i s}{\beta^2} \right),$$

where θ_2 is a Jacobi theta function defined by

$$\theta_2(z, \tau) = e^{i\tau\frac{\pi}{4} + i\pi z} \theta\left(z + \frac{\tau}{2}, \tau\right) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\pi z(2n+1)} e^{i\pi\tau(n+\frac{1}{2})^2}, \quad (3.28)$$

with

$$\theta(z, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i n z + \pi i n^2 \tau}$$

(to our knowledge, it does not exist an unambiguous definition in the literature, see [AS64, Chap. 16] and [Bel61] for example), and

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} (p \cdot q) e^{-s(p^2 - 2(1-u)p \cdot q)} dp &= q \cdot \nabla_x \left(\int_{\mathbb{R}^3} e^{p \cdot x - s p^2 + 2s(1-u)p \cdot q} dp \right) \Big|_{x=0} \\ &= \left(\frac{\pi}{s} \right)^{3/2} (1-u) q^2 e^{s(1-u)^2 q^2}, \end{aligned}$$

we get

$$G(q, \beta) = -\frac{q^2}{\beta\pi^{3/2}} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{d}{ds} \theta_2 \left(0, \frac{4\pi i s}{\beta^2} \right) \right) s^{1/2} e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} ds u (1-u) du. \quad (3.29)$$

Integrating by parts, we then get

$$\begin{aligned} G(q, \beta) &= \frac{q^2}{\beta\pi^{3/2}} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \theta_2 \left(0, \frac{4\pi i s}{\beta^2} \right) e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} \\ &\quad \times \left(\frac{1}{2s^{1/2}} - s^{1/2} (m_j^2 + u(1-u)q^2) \right) ds u (1-u) du. \end{aligned}$$

We now want to properly normalise the function $G(q)$ so as to reproduce the dielectric response of Dirac's vacuum at null temperature when T goes to zero. As shown by Dittrich in [Dit79], this can be done by extracting the $n = 0$ term in the series defining the function θ_2 above:

$$\theta_2 \left(0, \frac{4\pi i s}{\beta^2} \right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-s \frac{4\pi^2}{\beta^2} (n - \frac{1}{2})^2} = \left(\frac{1}{\pi s} \right)^{1/2} \frac{\beta}{2} \left[1 + \sum_{n \neq 0} e^{-\frac{\beta^2}{4s} n^2} e^{-i\pi n} \right], \quad (3.30)$$

where in the second equality we first use Poisson summation formula [Bel61, Formula 6.5] and then extract the $n = 0$ term. Thus, our result can be expressed so far as

$$G(q, \beta) = G^0(q) + G^T(q, \beta),$$

where

$$G^0(q) = \frac{q^2}{2\pi^2} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} \left(\frac{1}{2s} - (m_j^2 + u(1-u)q^2) \right) ds u (1-u) du$$

is the null temperature term, and

$$G^T(q, \beta) = \frac{q^2}{\beta\pi^{3/2}} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left(\theta_2 \left(0, \frac{4\pi i s}{\beta^2} \right) - \left(\frac{1}{\pi s} \right)^{1/2} \frac{\beta}{2} \right) e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} \\ \times \left(\frac{1}{2s^{1/2}} - s^{1/2} (m_j^2 + u(1-u)q^2) \right) ds u(1-u) du$$

contains the non-zero temperature contribution. Let us now focus on the function G^0 . Integrating by parts and again thanks to conditions (3.12), we have

$$\int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} s^{-1} ds \\ = \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \log(s) e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} (m_j^2 + u(1-u)q^2) ds.$$

The change of variables $\sigma = s(m_j^2 + u(1-u)q^2)$ yields

$$\int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2)} s^{-1} ds = \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \log \left(\frac{\sigma}{m_j^2 + u(1-u)q^2} \right) e^{-\sigma} d\sigma \\ = - \sum_{j=0}^2 c_j \log(m_j^2 + u(1-u)q^2),$$

and

$$\int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-\sigma} d\sigma u(1-u) du = - \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j u(1-u) du = 0,$$

thanks to conditions (3.12). Finally, we get

$$G^0(q) = - \frac{q^2}{4\pi^2} \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j \log(m_j^2 + u(1-u)q^2) u(1-u) du = \frac{q^2}{8\pi} M^0(q).$$

Let us now focus on G^T which can be written as follows:

$$G^T(q, \beta) = \frac{q^2}{2\pi^2} \sum_{n \neq 0} (-1)^n \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2) - \frac{\beta^2 n^2}{4} \frac{1}{s}} \\ \times \left(\frac{1}{2s} - (m_j^2 + u(1-u)q^2) \right) ds u(1-u) du.$$

We then use the identity (see [GR65, Formulas (3.324(1)) and (3.471(9))])

$$\int_0^\infty x^{\nu-1} \exp \left(-\alpha \frac{1}{x} - \gamma x \right) dx = 2 \left(\frac{\alpha}{\gamma} \right)^{\nu/2} K_\nu(2\sqrt{\alpha\nu}), \quad \operatorname{Re}\beta, \operatorname{Re}\gamma > 0,$$

to compute

$$\int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \frac{1}{2s} e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2) - \frac{\beta^2 n^2}{4} \frac{1}{s}} ds = \sum_{j=0}^2 c_j K_0 \left(\beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} \right)$$

and

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-s(m_j^2 + u(1-u)q^2) - \frac{\beta^2 n^2}{4} \frac{1}{s}} (m_j^2 + u(1-u)q^2) ds \\ = \sum_{j=0}^2 c_j \beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} K_1 \left(\beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} \right), \end{aligned}$$

where K_0 and K_1 are modified Bessel functions of second kind [AS64, Chap. 9]. Finally, by using the parity of Bessel functions, we get

$$\begin{aligned} G^T(q, \beta) = \frac{q^2}{\pi^2} \sum_{n=1}^\infty (-1)^n \int_0^1 \sum_{j=0}^2 c_j \left[K_0 \left(\beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} \right) \right. \\ \left. - \beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} K_1 \left(\beta n \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2} \right) \right] u(1-u) du. \end{aligned}$$

Now, by exploiting the Sommerfeld integral representation [NO83, pp. 328] for Bessel functions of second kind,

$$K_\nu(x) = \int_0^\infty e^{-x \cosh t} \cosh(\nu t) dt, \quad x > 0,$$

and by rearranging the integrals and the series thanks to conditions (3.12), we get

$$\begin{aligned} G^T(q, \beta) = \frac{q^2}{\pi^2} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 \sum_{n=1}^\infty (-1)^n c_j \left(e^{-nX_j(\beta, u, q) \cosh t} \right. \\ \left. - nX_j(\beta, u, q) \cosh t e^{-nX_j(\beta, u, q) \cosh t} \right) dt u(1-u) du, \end{aligned}$$

where $X_j(\beta, u, q) = \beta \sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2}$ for $j = 0, 1, 2$. Finally, the identities

$$\sum_{n=1}^\infty \left(-e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \right)^n = -\frac{e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}}{1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}}$$

and

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^\infty nX_j(\beta, u, q) \cosh t \left(-e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \right)^n \\ = X_j(\beta, u, q) \cosh t e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \frac{d}{dy} \frac{y}{1+y} \Big|_{y=e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}} \\ = X_j(\beta, u, q) \cosh t \frac{e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}}{\left(1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \right)^2} \end{aligned}$$

yield

$$G^T(q, \beta) = -\frac{q^2}{\pi^2} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \frac{e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \left(1 + X_j(\beta, u, q) \cosh t + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}\right)}{\left(1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}\right)^2} \times dt u(1-u) du. \quad (3.31)$$

Now,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta G^T(q, b) db &= -\frac{q^2}{\pi^2} \int_0^1 \int_0^\infty \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \sum_{j=0}^2 c_j e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} \\ &\quad \times \frac{\left(1 + X_j(\beta, u, q) \cosh t + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}\right)}{\left(1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}\right)^2} dt u(1-u) du \end{aligned}$$

and integrating with respect to β we get

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta G^T(q, b) db &= -\frac{q^2}{\pi^2} \int_0^1 \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j \left[\frac{1}{1 + e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t}} + \frac{1}{X_j(\beta, u, q) \cosh t} (2 \log 2 \right. \\ &\quad \left. - \log \left((e^{X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) (e^{-X_j(\beta, u, q) \cosh t} + 1) \right) \right] dt u(1-u) du. \end{aligned}$$

Remarking that

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta G^T(q, b) db = \frac{q^2}{8\pi} M^T(q, \beta),$$

allows us to conclude the proof. \square

Remark 3.6. Notice that by (3.30) it is easy to see that G^T goes to zero as T goes to zero, or equivalently β goes to infinity, so as to recover the well known formula for the dielectric response of Dirac's vacuum at null temperature [Gra+13, Lemma 4.2]. \diamond

Remark 3.7. In our framework, by doing the same calculations with an electric potential V , we get a different function G since the beginning. By looking at the limit of this function as β goes to infinity and replacing the Riemann sum by an integral, we recover the same result found in [Gra+13, Formula (4.16)] in the null temperature case. \diamond

Remark 3.8. In order to convince the reader that our framework is coherent with what the authors have done in [HLS08], let us come back to the functional \mathcal{F} defined in (3.9). In presence of a purely electrostatic potential, instead of applying the Pauli-Villars regularisation technique, we could introduce a sharp cut-off by replacing the trace over the whole space by a trace in the space of operators acting on functions whose Fourier transform is compactly supported in a ball of radius Λ ,

$$\mathcal{F}_\Lambda(V, \beta) = -\frac{1}{\beta} \text{Tr}_\Lambda \left[\log \left(2 \cosh \frac{\beta D_m^V}{2} \right) \right].$$

By adding the infinite constant $(1/\beta) \text{Tr}_\Lambda [\log (2 \cosh \beta D_m^0/2)]$, we get a cut-off-regularised free energy functional. The Λ -trace results in integrals over $B(0, \Lambda)$ in the momentum space and our calculations reduce to the ones in [HLS08]. Thus, at non-zero temperature we get a response of Dirac's vacuum to the magnetic field different from the one to the electric potential, whereas it is known to be the same at null temperature. This explains

once more why an effect similar to the Debye screening appears only in presence of an electric field. \diamond

In order to complete the study of the second order term, the following lemma states the main properties of the non-zero temperature contribution M^T to the response function:

Lemma 3.9. *The function M^T given by (3.27) is well defined, bounded and such that*

$$M^0(q) + M^T(q, \beta) \geq 0,$$

where M^0 is given by (3.26).

Proof. We start remarking that M^T can be rewritten by means of Eq. (3.31) as

$$M^T(q, \beta) = -\frac{8}{\pi\beta} \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\beta \sum_{j=0}^2 c_j \frac{e^{-X_j(b,u,q) \cosh t} \left(1 + X_j(b, u, q) \cosh t + e^{-X_j(b,u,q) \cosh t}\right)}{\left(1 + e^{-X_j(b,u,q) \cosh t}\right)^2} \times db dt u(1-u) du,$$

where $X_j(b, u, q) = b\sqrt{m_j^2 + u(1-u)q^2}$ for $j = 0, 1, 2$. Every term in the Pauli-Villars sum is obviously positive and can be estimated as follows:

$$\begin{aligned} & \frac{e^{-X_j(b,u,q) \cosh t} \left(1 + X_j(b, u, q) \cosh t + e^{-X_j(b,u,q) \cosh t}\right)}{\left(1 + e^{-X_j(b,u,q) \cosh t}\right)^2} \\ & \leq e^{-X_j(b,u,q) \cosh t} (1 + X_j(b, u, q) \cosh t) \\ & \leq 2 \left(e^{-X_j(b,u,q) \cosh t} + e^{-\frac{1}{2}X_j(b,u,q) \cosh t}\right) \\ & \leq 4e^{-\frac{1}{2}X_j(b,u,q) \cosh t} \\ & \leq 4e^{-\frac{1}{2}X_j(b,u,q) \left(1 + \frac{t^2}{2}\right)}, \end{aligned}$$

so that

$$\begin{aligned} & \frac{4}{\beta} \int_0^1 u(1-u) \int_0^\beta e^{-\frac{1}{2}X_j(b,u,q)} \int_0^\infty e^{-\frac{t^2}{4}X_j(b,u,q)} dt db du \\ & = \frac{2\sqrt{\pi}}{3\sqrt{m_j}\beta} \int_0^\beta \frac{1}{\sqrt{X_j(b, u, q)}} e^{-\frac{1}{2}X_j(b,u,q)} db \\ & \leq \frac{4\sqrt{\pi}}{3\sqrt{m_j}} \frac{1}{\sqrt{\beta}}. \end{aligned}$$

In particular, the previous calculations show that the function M^T is well defined and bounded. Now, in order to conclude the proof, let us recall that

$$\frac{q^2}{8\pi} \left(M^0(q) + M^T(q, \beta)\right) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta G(q, b) db$$

and $G(q, \beta) \geq 0$ by [GLS18, Lemma 11]. Indeed,

$$\frac{d}{ds} \theta_2 \left(0, \frac{4\pi is}{\beta^2} \right) = -\frac{4\pi^2}{\beta^2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-\frac{4\pi^2}{\beta^2} s (n + \frac{1}{2})^2} \leq 0$$

and in particular the function G is given by (3.29). \square

Remark 3.10. The calculations in the previous proof show that M^T vanishes as β goes to infinity as expected since we isolated the zero temperature term M^0 . In addition, let us notice that the terms corresponding to c_1 and c_2 goes to zero when $m_1, m_2 \rightarrow \infty$, that is in the large cut-off limit (recall formula (3.13)). Since the $j = 0$ term is negative, this implies that M^T stays negative for Λ large enough. \diamond

3.3 Proof of the second part of Theorem 3.2

First of all, given any $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap \dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$, we proved that the functional \mathcal{F}_{PV} is well defined and can be written as

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) = \mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) + \mathcal{R}(A, \beta),$$

where

$$\mathcal{F}_{\text{PV},2}(B, \beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_2(A, b)) db$$

and

$$\mathcal{R}(A, \beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta [\text{Tr}(T_4(A, b)) + \text{Tr}(T_6(A, b))] db.$$

Almost the same proof as in [Gra+13, Theorem 2.1] holds, by replacing [Gra+13, Lemma 4.1] by Lemma 3.4 and [Gra+13, Lemma 4.2] by Lemma 3.5. In order to include a finite temperature, as already remarked in Lemma 3.5, recall that we simply have to make the following formal replacements:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} d\omega &\rightarrow \frac{1}{2\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}}, \\ \omega \in \mathbb{R} &\rightarrow \omega(k, \beta) = \frac{(2k-1)\pi}{\beta}, \quad k \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

where $\beta = 1/T \in (0, \infty)$, and then to consider the averaged primitive function with respect to β of each term in the expansion. In this case, it is important to notice that the universal constant K in [Gra+13, Lemma 4.4] and [Gra+13, proof of Lemma 4.5] is $O(\beta)$ as $\beta \rightarrow 0$. This is crucial in order to get the finite constant κ in (3.15). In addition, note that 0 is never an eigenvalue of the magnetic Dirac operator by Lemma 3.1. Finally, a proof of the properties of M^T can be found in Lemma 3.9. \square

4 The regime of slowly varying magnetic fields: proof of Theorem 3.3

This section is devoted to the proof of Theorem 3.3. In order to do so, we will exploit the general scheme used in the proof of [GLS18, Proposition 17]. Thus, let us recall the general setting: we consider a scaled magnetic field $B_\varepsilon(x) = B(\varepsilon x)$ with $B \in C^0(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ such that $\text{div} B = 0$ and satisfying the assumptions (3.18). By [GLS18, Lemma 5], let A

be the unique potential in $\dot{H}_{\text{div}}^1(\mathbb{R}^3)$ such that $B = \text{curl}A$, and let A_ε be the potential associated to B_ε . We are interested in studying the asymptotic behaviour of the free energy functional $\mathcal{F}_{\text{PV}}(A_\varepsilon, \beta)$ of Dirac's vacuum as $\varepsilon \rightarrow 0$, that is in the limit of slowly varying purely magnetic fields.

Similarly to what has been done in Section 3.1, we rewrite Formula (3.20) as follows:

$$x \tanh x = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{4x^2}{(2k-1)^2 \pi^2 + 4x^2} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(1 - \frac{(2k-1)^2 \pi^2}{(2k-1)^2 \pi^2 + 4x^2} \right), \quad (3.32)$$

in order to express the free energy functional \mathcal{F}_{PV} of Dirac's vacuum as

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \text{Tr}(T_A(b)) \, db \\ &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \text{Tr} \left[\sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{(D_{m_j}^A)^2 + \omega(k, b)^2} - \frac{1}{(D_{m_j}^0)^2 + \omega(k, b)^2} \right) \right] \\ &\quad \times \omega(k, b)^2 \frac{db}{b}. \end{aligned}$$

Notice that the series is convergent in the operator norm thanks to the following estimate:

$$\left\| \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{(D_{m_j}^A)^2 + \omega(k, \beta)^2} - \frac{1}{(D_{m_j}^0)^2 + \omega(k, \beta)^2} \right) \right\| \leq \frac{C}{(m^2 + \omega(k, \beta)^2)^3}.$$

In this section, we prefer working with Formula (3.32) rather than (3.21) in order to make the square of the Dirac operator appear, which is positive definite and allows us to rewrite $T_A(b)$ in a block-diagonal form in the two-spinor basis:

$$T_A(b) = \frac{1}{b} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{\mathcal{P}_A + m_j^2 + \omega(k, b)^2} - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega(k, b)^2} \right) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2},$$

where \mathcal{P}_A is the Pauli operator defined as $\mathcal{P}_A = (\sigma \cdot (-i\nabla + A))^2 = (-i\nabla + A)^2 - \sigma \cdot B$ such that

$$|D_m^A|^2 = \begin{bmatrix} \mathcal{P}_A + m^2 & 0 \\ 0 & \mathcal{P}_A + m^2 \end{bmatrix} = (\mathcal{P}_A + m^2) \otimes \mathbf{1}_{\mathbb{C}^2}.$$

By Theorem 3.2, the operator $T_A(b)$ is trace class when $A \in L^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \cap H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$, but in this section we simply have $B \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$, which does not imply the associated potential A to be integrable. Thus, $T_A(b)$ is not necessarily trace class in our framework. Fortunately, the non-trace class part can be easily isolated and is linear in A . Indeed, by adjusting [GLS18, Proposition 6] to the non-zero temperature case by means of the previously mentioned replacements, we know that, under our assumptions on B ,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{PV}}(A, \beta) &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \text{Tr} \left[\left(\sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{\mathcal{P}_A + m_j^2 + \omega(k, b)^2} - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega(k, b)^2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega(k, b)^2} (p \cdot A + A \cdot p) \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega(k, b)^2} \right) \right] \omega(k, b)^2 \frac{db}{b}. \quad (3.33) \end{aligned}$$

As done in [GLS18, Step 3], we now introduce a Gaussian function G_ρ given by

$$G_\rho(x) = (\pi\rho)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{\rho^2}}$$

and such that

$$\int_{\mathbb{R}^3} G_\rho(x-y)^2 dy = 1, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3,$$

which will play the role of a continuous partition of unity and allow us to localise the free energy functional in order to work on sets of fixed size where the slowly varying magnetic field is almost constant. We refer the reader to [GLS18, Lemma 7] for some properties about this Gaussian family. Now, by localising the operator inside the parenthesis by means of the functions G_ρ , the functional (3.33) can be rewritten as

$$\mathcal{F}_{\text{PV}}(A_\varepsilon, \beta) = \frac{2\varepsilon^{-3}}{\beta} \int_0^\beta \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_{\omega(k,b)}(A_{\varepsilon,y}) \omega(k,b)^2 dy \frac{db}{b},$$

where

$$A_{\varepsilon,y}(x) = \varepsilon^{-1} A(y + \varepsilon x)$$

and

$$f_\omega(A) = \text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)} \left[G_\rho \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{\mathcal{P}_A + m_j^2 + \omega^2} - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega^2} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega^2} (p \cdot A + A \cdot p) \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega^2} \right) G_\rho \right].$$

Thanks to the localisation procedure, the term containing $p \cdot A + A \cdot p$, which was subtracted because of its non-trace-class nature, becomes trace class with vanishing trace [GLS18, Lemma 8]. As a consequence, f_ω can be simplified as follows:

$$f_\omega(A_{\varepsilon,y}) = \text{Tr}_{L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)} \left[G_\rho \sum_{j=0}^2 c_j \left(\frac{1}{\mathcal{P}_{A_{\varepsilon,y}} + m_j^2 + \omega^2} - \frac{1}{\mathcal{P}_0 + m_j^2 + \omega^2} \right) G_\rho \right].$$

Now, the idea is to replace the potential $A_{\varepsilon,y}$ in the formula above by the potential $B(y) \times x/2$ of the constant field $B(y)$, up to a small error. In order to do so, we first need to extend the definition of f_ω to potentials with a linear growth at infinity. This is doable thanks to [GLS18, Proposition 9]. In particular, the functional f_ω is gauge invariant, meaning that

$$f_\omega(A) = f_\omega(A + \nabla\theta), \quad \text{for any } \theta \in C^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}).$$

Then, applying [GLS18, Formula (55)] to $A_{\varepsilon,y}$ gives

$$\frac{A(y + \varepsilon x)}{\varepsilon} = \nabla_x \left(x \cdot \int_0^1 \frac{A(y + t\varepsilon x)}{\varepsilon} dt \right) + B(y) \times \frac{x}{2} + \varepsilon R_{\varepsilon,y}(x), \quad (3.34)$$

where

$$R_{\varepsilon,y}(x) = x \times \int_0^1 \frac{B(y) - B(y + t\varepsilon x)}{\varepsilon} t dt.$$

The main idea now is that the gradient term in (3.34) can be removed in the argument of

the functional f_ω thanks to its gauge invariance property. The remaining potential does not satisfy the Coulomb gauge anymore, but rather the Poincaré (also called multipolar or Fock-Schwinger) gauge,

$$x \cdot A(x + y) = 0.$$

Finally, the free energy functional \mathcal{F}_{PV} of Dirac's vacuum can be rewritten as

$$\begin{aligned} \varepsilon^3 \mathcal{F}_{\text{PV}}(A_\varepsilon, \beta) &= \frac{2}{\beta} \int_0^\beta \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)}(A_{\varepsilon, y}) dy \frac{db}{b} \\ &= \frac{2}{\beta} \int_0^\beta \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)} \left(B(y) \times \frac{\cdot}{2} + \varepsilon R_{\varepsilon, y} \right) dy \frac{db}{b} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{2}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)} \left(B(y) \times \frac{\cdot}{2} \right) \frac{db}{b} \right] dy \\ &\quad + \frac{2}{\beta} \int_0^\beta \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 \left[f_{\omega(k, b)} \left(B(y) \times \frac{\cdot}{2} + \varepsilon R_{\varepsilon, y} \right) - f_{\omega(k, b)} \left(B(y) \times \frac{\cdot}{2} \right) \right] dy \frac{db}{b}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Thus, it only remains to study the two terms in Eq. (3.35). This is the content of the next two lemmas. We start by computing an explicit formula for the first term:

Lemma 3.11. *Under the assumptions of Theorem 3.3,*

$$\frac{2}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)} \left(B(y) \times \frac{\cdot}{2} \right) \frac{db}{b} = f_{\text{PV}}^0(|B(y)|) + f_{\text{PV}}^T(|B(y)|, \beta),$$

where

$$f_{\text{PV}}^0(a) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (sa \coth(sa) - 1) \frac{ds}{s^3}$$

and

$$f_{\text{PV}}^T(a, \beta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} (s|B| \coth(s|B|) - 1) \sum_{n=1}^\infty (-1)^n e^{-\frac{\beta^2 n^2}{4s}} \frac{ds}{s^3}. \quad (3.36)$$

Proof. By [GLS18, Proposition 16], we know that, if B is constant,

$$f_\omega \left(B \times \frac{x}{2} \right) = \frac{1}{4\pi^{3/2}} \int_0^\infty e^{-s\omega^2} \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \frac{ds}{s^{3/2}}.$$

Therefore,

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)} \left(B \times \frac{\cdot}{2} \right) \frac{db}{b} \\
&= \frac{1}{2\beta\pi^{3/2}} \int_0^\beta \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 e^{-s\omega(k, b)^2} \frac{ds}{s^{3/2}} \frac{db}{b} \\
&= -\frac{1}{2\beta\pi^{3/2}} \int_0^\beta \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \frac{d}{ds} \theta_2 \left(0, \frac{4\pi is}{b^2} \right) \frac{ds}{s^{3/2}} \frac{db}{b} \\
&= \frac{1}{2\beta\pi^{3/2}} \int_0^\beta \int_0^\infty \frac{d}{ds} \left[\frac{1}{s^{3/2}} \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \right] \theta_2 \left(0, \frac{4\pi is}{b^2} \right) ds \frac{db}{b},
\end{aligned}$$

where θ_2 is defined by (3.28) and B denotes $B(y)$ for fixed y . As done in the proof of Lemma 3.5, we apply again Dittrich's method [Dit79] in order to isolate the non-zero temperature contribution from the null temperature term. Thus, thanks to Eq. (3.30), we can rewrite the equation above as follows:

$$\frac{2}{\beta} \int_0^\beta \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega(k, b)^2 f_{\omega(k, b)} \left(B \times \frac{\cdot}{2} \right) \frac{db}{b} = f_{\text{PV}}^0(|B|) + f_{\text{PV}}^T(|B|, \beta),$$

where

$$f_{\text{PV}}^0(|B|) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{d}{ds} \left[\frac{1}{s^{3/2}} \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \right] \frac{1}{s^{1/2}} ds$$

and

$$\begin{aligned}
f_{\text{PV}}^T(|B|, \beta) &= \frac{1}{2\beta\pi^2} \int_0^\beta \int_0^\infty \frac{d}{ds} \left[\frac{1}{s^{3/2}} \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \right] \\
&\quad \times \frac{1}{s^{1/2}} \sum_{n=1}^\infty (-1)^n e^{-\frac{b^2 n^2}{4s}} ds db.
\end{aligned}$$

Let us now focus on f_{PV}^0 . By computing the derivative of the product and integrating by parts once more one of the resulting terms, we finally get

$$f_{\text{PV}}^0(|B|) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \left(\sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} \right) (s|B| \coth(s|B|) - 1) \frac{ds}{s^3},$$

which is the well known Euler-Heisenberg energy function at null temperature [GLS18]. Then, let us focus on f_{PV}^T . Again, similarly to what we did for the zero temperature term,

we get

$$\begin{aligned} f_{\text{PV}}^T(|B|, \beta) &= \frac{1}{4\beta\pi^2} \int_0^\beta \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} (s|B| \coth(s|B|) - 1) \sum_{n=1}^\infty (-1)^n e^{-\frac{b^2 n^2}{4s}} \frac{ds}{s^3} db \\ &\quad - \frac{1}{4\beta\pi^2} \int_0^\beta \int_0^\infty \sum_{j=0}^2 c_j e^{-sm_j^2} (s|B| \coth(s|B|) - 1) \sum_{n=1}^\infty (-1)^n \frac{b^2 n^2}{4s} e^{-\frac{b^2 n^2}{4s}} \frac{ds}{s^3} db. \end{aligned}$$

Noticing that

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta \left(1 - \frac{b^2 n^2}{2s}\right) e^{-\frac{b^2 n^2}{4s}} db = e^{-\frac{\beta^2 n^2}{4s}},$$

we get Eq. (3.36) and this allows us to conclude the proof. \square

Remark 3.12. Since the thermal contribution in (3.36) is still convergent even without the Pauli-Villars regularisation (which is instead necessary to make the zero temperature term convergent), one could look at the UV limit, i.e. $\Lambda \rightarrow \infty$ or equivalently $m_1, m_2 \rightarrow \infty$. In this limit, it turns out that this contribution converges to the non-regularised term found by Dittrich [Dit79], up to the already mentioned rotation of the complex plane. For this reason, it would be interesting to study the renormalisation formula in our case and to prove that there are no thermal contributions appearing, meaning that it still coincides with the renormalisation formula at null temperature. \diamond

Finally, it only remains to give an estimate of the remainder in the second line of (3.35):

Lemma 3.13. *Under the assumptions of Theorem 3.3, we have, for every $0 < \varepsilon \leq 1$,*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left| f_{\omega(k,b)} \left(B(y) \times \frac{\dot{}}{2} + \varepsilon R_{\varepsilon,y} \right) - f_{\omega(k,b)} \left(B(y) \times \frac{\dot{}}{2} \right) \right| dy \leq C \frac{\varepsilon}{(m^2 + \omega(k,b)^2)^2},$$

where C is a constant depending only on B , ρ and the c_j 's and m_j 's.

Proof. The proof is the same as in [GLS18, Proposition 17]. \square

Formula (3.35) together with Lemma 3.11 and Lemma 3.13 allows us to conclude the proof. \square

Vacuum polarisation in a one-dimensional effective QED model

This chapter is based on a joint work with Timothée Audinet, Antoine Levitt and Julien Toulouse, available soon on arXiv.

Abstract

With the aim of progressing toward a practical implementation of an effective quantum electrodynamics (QED) theory of atoms and molecules, including the effects of vacuum polarisation through the creation of virtual electron-positron pairs but without the explicit photon degrees of freedom, we study a one-dimensional effective QED model of the hydrogen-like atom with delta potential interactions. This model is similar to the three-dimensional effective QED theory with Coulomb interactions while being substantially simpler. We provide some mathematical details about the definition of this model and calculate the vacuum polarisation density in addition to the Lamb shift of the bound state energy, correcting and extending results of previous works. We also study the approximation of the model in a finite plane wave basis and in particular we discuss the basis convergence of the bound state energy and eigenfunction as well as of the vacuum polarisation density and of the Lamb shift of the bound state energy. We highlight the difficulty in approximating the vacuum polarisation density and we propose a way to improve the convergence. The present work could give hints on how to perform similar calculations for the three-dimensional effective QED theory of atoms and molecules.

Contents

1	Introduction	93
2	Exact 1D hydrogen-like Dirac model	94
	2.1 Hamiltonian	94
	2.2 Vacuum polarisation density	95
	2.3 QED corrections to the bound state energy	102
3	Finite dimensional approximation to the 1D hydrogen-like Dirac model	104
	3.1 Calculations in a finite plane wave basis	104
	3.2 Convergence of the bound state energy and eigenfunction	105
	3.3 Convergence of the vacuum polarisation density	106
	3.4 Convergence of the QED correction to the bound state energy	109
4	Conclusion	110
Appendix A. Matrix elements of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian		110
Appendix B. Approximation of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian with regular potentials		113
Appendix C. Rate of convergence of the bound state energy in a plane wave basis		115

1 Introduction

It is important to take the effects of special relativity into account in the study of quantum electronic structure of atoms, molecules and solids [Pyy12; Pyy11; Aut12]. State-of-the-art calculations of relativistic electronic structures are based on the Dirac-Coulomb-Breit Hamiltonian in the no-pair approximation (see, e.g., [SV03; DF07; RW09]). The next step is to go beyond the no-pair approximation, by including the quantum electrodynamics (QED) effects of virtual electron-positron pairs. This is extremely important for highly accurate calculations as well as to put relativistic theory of electronic structures on a deeper theoretical background.

Highly accurate perturbative methods for the calculation of bound states have been developed based on QED but are limited to few-electron atomic systems (see, e.g., [MPS98; Sha02; LSÅ04; IM17; NMM24]). For many-electron atoms and molecules, it has been proposed to estimate QED corrections with model one-electron operators (see, e.g., [PZ03; STY13; Sch+15; Paš+17; Mal+22; Sal22; Skr21; SSS22; FGQ24a; FGQ24b]). An appealing approach for ab initio calculations of relativistic electronic structures beyond the no-pair approximation is given by an effective QED theory, which includes the effects of vacuum polarisation through the creation of virtual electron-positron pairs but still uses a static Coulomb or Coulomb-Breit two-particle interaction instead of explicit photons (see, e.g., [CI89; SV03; Kut12; LL13; Liu14a; Liu14b; Liu20; Tou21; Liu22; AT23]). This effective QED theory with the Coulomb two-particle interaction has been the subject of a number of detailed mathematical studies which established the validity of this approach at the Hartree-Fock level [HLS05a; HLS05b; HLS07; Hai+07; GLS09; HLS09; GLS11; Lew11a]. Based on this effective QED theory, it has been proposed to formulate a relativistic density functional theory [Tou21] and a relativistic reduced density matrix functional theory [RGV22].

As in full QED, the difficulty in this effective QED theory lies in the fact that it contains infinities. In particular, the vacuum polarisation density diverges in the ultraviolet (UV) limit (see, e.g., [HS03]). This UV divergence can be regularised with a UV momentum cut-off and the dependence on the cut-off can be absorbed into a redefinition of the elementary charge, which is called *charge renormalisation* (see, e.g., [Hai+07; Lew11a]). However, it is currently not clear how to deal with this situation in a finite basis and consequently no practical implementation of this effective QED theory has been done so far.

In order to progress toward the goal of a practical implementation of the above-mentioned effective QED model for atomic and molecular calculations, this theory was studied in [AT23] in the context of a one-dimensional (1D) model of the relativistic hydrogen-like atom using delta potential interactions. In the non-relativistic version of this model [Fro56; HS75; Her86; TGT22], the use of the delta potential is motivated by the fact that it leads to the same ground state energy and wave function as the ground state energy and radial wave function of the three-dimensional (3D) hydrogen-like atom with the Coulomb potential. The relativistic version of this model without QED effects was also previously studied [SB72; Lap83; FLB12; Gui+19]. The calculation of the vacuum polarisation density in this model was first attempted in [NB86]. A more accurate study of the QED effects, including the Lamb shift of the bound state energy, was performed in [AT23]. The interest in this 1D effective QED model lies in the fact that it is similar to the 3D effective QED theory with Coulomb interactions while being substantially simpler.

In the present work, we reexamine in more mathematical details this 1D effective QED model, correcting and extending results of previous works. In particular, we perform a more careful calculation of the exact vacuum polarisation density and show that there is a

Dirac delta contribution that was missed in the previous calculations. We also study the calculation of the vacuum polarisation density in a finite plane wave basis, highlighting the difficulty of approximating this quantity with respect to the size of the basis, and we propose a way to improve the convergence of the calculation.

The paper is organised as follows. In Section 2, we provide the mathematical definition of the 1D hydrogen-like Dirac model, we perform the calculation of the exact vacuum polarisation density and discuss the resulting QED correction to the bound state energy. In Section 3, we study the approximation of the model in a finite plane wave basis: we discuss the convergence of the bound state energy and eigenfunction, the convergence of the vacuum polarisation density as well as of the QED correction to the bound state energy with respect to the size of the basis. Finally, Section 4 contains our conclusions. In the appendices, we provide some mathematical details about the definition of the Hamiltonian of the present model and about the rate of convergence of the bound state energy in a plane wave basis.

2 Exact 1D hydrogen-like Dirac model

In this section, we study the 1D hydrogen-like Dirac model in the exact infinite dimensional setting.

2.1 Hamiltonian

We consider a 1D spinless relativistic electron with two-component states in the Hilbert space $\mathfrak{h} = L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$. The 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian with an electrostatic nucleus-electron Dirac delta potential can be formally defined as [Lap83; AT23]

$$\mathfrak{D}_Z = \mathfrak{D}_m^0 - Z\delta(x)\mathbf{I}_2, \quad (4.1)$$

where \mathfrak{D}_m^0 is the 1D free 2×2 Dirac operator,

$$\mathfrak{D}_m^0 = c\sigma_1 p_x + \sigma_3 m c^2,$$

where $p_x = -i d/dx$ is the momentum operator, c is the speed of light, m is the electron mass, σ_1 and σ_3 are the 2×2 Pauli matrices,

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$Z \geq 0$ is the nuclear charge and \mathbf{I}_2 is the 2×2 identity matrix. For all the other usual physical constants, we always assume atomic units in which $\hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$.

The delta potential in (4.1) makes in fact the definition of \mathfrak{D}_Z ambiguous. There are several self-adjoint operators \mathfrak{D}_Z compatible with the above formal definition. As in [AT23], we choose the self-adjoint operator \mathfrak{D}_Z defined as having the same action of \mathfrak{D}_m^0 for $x \neq 0$, i.e.

$$\mathfrak{D}_Z \psi = \mathfrak{D}_m^0 \psi \quad \text{on} \quad \mathbb{R} \setminus \{0\}, \quad (4.2)$$

with the Z -dependent domain [Šeb89; BD94; Hug97; Hug99; PR14]

$$\text{Dom}(\mathfrak{D}_Z) = \left\{ \psi \in H^1(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C}^2) \mid \psi(0^+) = M_Z \psi(0^-) \right\}. \quad (4.3)$$

In Eq. (4.3), $H^1(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C}^2) \simeq H^1(\mathbb{R}^-, \mathbb{C}^2) \oplus H^1(\mathbb{R}^+, \mathbb{C}^2)$ and M_Z is the following

unitary 2×2 matrix imposing a boundary condition at $x = 0$ [SB72; Lap83; FLB12]:

$$M_Z = \begin{bmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

with $\theta = 2 \arctan (Z/2c)$.

The Hamiltonian \mathfrak{D}_Z has a single bound state with energy [Lap83; CN87; NB86; AT23]

$$\varepsilon_b^Z = mc^2 \frac{1 - (Z/2c)^2}{1 + (Z/2c)^2} \quad (4.5)$$

and eigenfunction

$$\psi_b^Z(x) = A_b \begin{bmatrix} 1 \\ i \operatorname{sign}(x) Z/2c \end{bmatrix} e^{-\kappa_b |x|}, \quad (4.6)$$

where sign is the sign function, $\kappa_b = mZ / (1 + (Z/2c)^2)$ and $A_b = \sqrt{\kappa_b / (1 + (Z/2c)^2)}$. Note that the large (upper) component of the bound state eigenfunction is an even function of x , while the small (lower) component is an odd function of x with a discontinuity at $x = 0$. Beside the eigenvalue ε_b^Z , the Hamiltonian \mathfrak{D}_Z has also the essential spectrum $(-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty)$. At $Z = 0$, only the continuous energy spectrum $(-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty)$ remains. The bound state energy in (4.5) is strictly positive for $Z < 2c$. Moreover, the bound state energy level never dives into the negative energy continuum for all $Z > 0$. The bound state energy only approaches the top of the negative energy continuum as $Z \rightarrow \infty$, i.e. $\lim_{Z \rightarrow \infty} \varepsilon_b^Z = -mc^2$. Hence, there are no supercritical QED effects in the present model [LS90; NPT90].

In Appendix A., we argue that the matrix elements of the Hamiltonian \mathfrak{D}_Z can be defined on a larger Z -independent set of functions with the expression

$$\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle = \langle \phi, \mathfrak{D}_m^0 \psi \rangle - Z \bar{\phi}^*(0) \bar{\psi}(0), \quad (4.7)$$

where $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denotes the inner product of $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$, $\bar{\psi}(0) = [\psi(0^+) + \psi(0^-)]/2$ and $\bar{\phi}(0) = [\phi(0^+) + \phi(0^-)]/2$. Most importantly, Eq. (4.7) can be used to calculate the matrix elements of the Hamiltonian on a basis of functions which are continuous and thus which do not belong to the domain considered in (4.3).

2.2 Vacuum polarisation density

The vacuum polarisation density n^{VP} for the 1D hydrogen-like Dirac model was calculated in [NB86; AT23]. However, these calculations were only valid out of the origin. Here, we reexamine the calculation of the vacuum polarisation density using the momentum space Green function and show that there is a Dirac delta function contribution at the origin that was missed in the previously cited works.

General expression in terms of the Green function

The formal definition of the Hamiltonian in (4.1) or the definition via matrix elements in (4.7) leads to the following expression for the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian in momentum space:

$$\mathfrak{D}_Z(p, p') = \mathfrak{D}_m^0(p, p') + V(p, p'),$$

with

$$\mathfrak{D}_m^0(p, p') = \delta(p - p') [c\sigma_1 p + \sigma_3 mc^2] \quad \text{and} \quad V(p, p') = -\frac{Z}{2\pi} \mathbf{I}_2. \quad (4.8)$$

The Green function (or resolvent) operator $G_0(\omega) = (\omega \mathbf{I}_2 - \mathfrak{D}_m^0)^{-1}$ of the 1D free Dirac operator \mathfrak{D}_m^0 in momentum space is, for $\omega \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\mathfrak{D}_m^0)$ where $\sigma(\mathfrak{D}_m^0)$ is the spectrum of \mathfrak{D}_m^0 ,

$$G_0(p, p'; \omega) = \frac{\delta(p - p')}{\omega^2 - \varepsilon_p^2} \begin{bmatrix} mc^2 + \omega & cp \\ cp & -mc^2 + \omega \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

with $\varepsilon_p = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$. The Green function operator $G_Z(\omega) = (\omega \mathbf{I}_2 - \mathfrak{D}_Z)^{-1}$ of the 1D hydrogen-like Dirac operator \mathfrak{D}_Z in momentum space satisfies the Dyson equation, for $\omega \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\mathfrak{D}_Z)$,

$$G_Z(p, p'; \omega) = G_0(p, p'; \omega) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G_0(p, p_1; \omega) V(p_1, p_2) G_Z(p_2, p'; \omega) dp_1 dp_2.$$

Using the expression of $V(p, p')$, the Dyson equation can be simplified as

$$G_Z(p, p'; \omega) = G_0(p, p'; \omega) - \frac{Z}{2\pi} \bar{G}_0(p; \omega) \bar{G}_Z(p'; \omega), \quad (4.10)$$

where $\bar{G}_0(p, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_0(p, p_1; \omega) dp_1$ and $\bar{G}_Z(p'; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_Z(p_2, p'; \omega) dp_2$. Integrating Eq. (4.10) over p gives

$$\bar{G}_Z(p'; \omega) = \bar{G}_0(p'; \omega) - \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_0(\omega) \bar{G}_Z(p'; \omega),$$

where $\bar{\bar{G}}_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{G}_0(p; \omega) dp$ and thus

$$\bar{G}_Z(p'; \omega) = \left[\mathbf{I}_2 + \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_0(\omega) \right]^{-1} \bar{G}_0(p'; \omega).$$

Inserting the last expression in Eq. (4.10), we obtain for the variation of the Green function due to the nucleus-electron potential, $\Delta G_Z(p, p'; \omega) = G_Z(p, p'; \omega) - G_0(p, p'; \omega)$,

$$\Delta G_Z(p, p'; \omega) = -\frac{Z}{2\pi} \bar{G}_0(p; \omega) \left[\mathbf{I}_2 + \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_0(\omega) \right]^{-1} \bar{G}_0(p'; \omega).$$

From Eq. (4.9), we can calculate \bar{G}_0 and $\bar{\bar{G}}_0$ as being equal to

$$\bar{G}_0(p; \omega) = \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_p^2} \begin{bmatrix} mc^2 + \omega & cp \\ cp & -mc^2 + \omega \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

and

$$\bar{\bar{G}}_0(\omega) = \frac{\pi}{c} \begin{bmatrix} -g(\omega) & 0 \\ 0 & g(-\omega) \end{bmatrix}, \quad (4.12)$$

with $g(\omega) = \sqrt{(mc^2 + \omega)/(mc^2 - \omega)}$. Notice that the off-diagonal elements of \bar{G}_0 behave as $1/p$ as $p \rightarrow \pm\infty$ and therefore the integral defining the off-diagonal elements of $\bar{\bar{G}}_0$ is divergent. However, we can define it by means of the Cauchy principal value, obtaining a vanishing quantity. This is justified in [Appendix B.](#) We finally arrive at the expression

of the variation of the Green function,

$$\Delta G_Z(p, p'; \omega) = -\frac{Z}{2\pi} \frac{z_1(\omega) A_1(p, p'; \omega) + z_2(\omega) A_2(p, p'; \omega)}{(\omega^2 - \varepsilon_p^2)(\omega^2 - \varepsilon_{p'}^2)},$$

with $g(\omega) = \sqrt{(mc^2 + \omega)/(mc^2 - \omega)}$, $z_1(\omega) = (1 - Zg(\omega)/2c)^{-1}$, $z_2(\omega) = (1 + Zg(-\omega)/2c)^{-1}$ and $A_1(p, p'; \omega)$ and $A_2(p, p'; \omega)$ being the following matrices:

$$A_1(p, p'; \omega) = \begin{bmatrix} (mc^2 + \omega)^2 & cp'(mc^2 + \omega) \\ cp(mc^2 + \omega) & c^2pp' \end{bmatrix},$$

$$A_2(p, p'; \omega) = \begin{bmatrix} c^2pp' & cp(-mc^2 + \omega) \\ cp'(-mc^2 + \omega) & (-mc^2 + \omega)^2 \end{bmatrix}.$$

The Fourier transform of the vacuum polarisation density matrix is given by (see, e.g., [WK56; HS03; Hai04; Hai+07])

$$\hat{\mathbf{n}}_1^{\text{vp}}(p, p') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta G_Z(p, p'; iu + \gamma) du, \quad (4.13)$$

where γ is a real constant such that $-mc^2 < \gamma < \varepsilon_b^Z$, and the Fourier transform of the local vacuum polarisation density matrix can then be obtained as (see, e.g., [HS03; Hai04; HLS05a; HLS07])

$$\hat{\mathbf{n}}^{\text{vp}}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{n}}_1^{\text{vp}}(p + k/2, p - k/2) dp. \quad (4.14)$$

The constant γ appearing in (4.13) allows to integrate only over the continuous negative energy spectrum avoiding the bound state energy ε_b^Z . From now on, we will assume that $Z < 2c$ so that the bound state eigenvalue ε_b^Z is always strictly positive and we will choose $\gamma = 0$. What we call the local vacuum polarisation density matrix is thus obtained as the inverse Fourier transform of $\hat{\mathbf{n}}^{\text{vp}}$,

$$\mathbf{n}^{\text{vp}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{n}}^{\text{vp}}(k) e^{ikx} dk, \quad (4.15)$$

i.e., it is the position space diagonal of the vacuum polarisation density matrix. Note that the slowest-decaying terms in the integrands in (4.13) and in (4.14) decay as $1/u^2$ and $1/p^2$, respectively, so that the integrals in in Eq. (4.13) and in Eq. (4.14) are both convergent. By contrast, as we will see later, the integrand in (4.15) contains terms that go to a constant as $k \rightarrow \pm\infty$ and thus the integral in (4.15) should be understood in the sense of distribution.

Uehling vacuum polarisation density

The integral in (4.13) can be calculated analytically at first order in Z , giving the Fourier transform of the 1D analogue of the Uehling vacuum polarisation density matrix,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}}_1^{\text{vp},(1)}(p, p') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta G_Z^{(1)}(p, p'; iu) du \\ &= -\frac{Z}{4\pi (\varepsilon_p^2 \varepsilon_{p'} + \varepsilon_p \varepsilon_{p'}^2)} \begin{bmatrix} m^2 c^4 + c^2 p p' - \varepsilon_p \varepsilon_{p'} & -m c^3 (p - p') \\ m c^3 (p - p') & m^2 c^4 + c^2 p p' - \varepsilon_p \varepsilon_{p'} \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

The Fourier transform of the local Uehling vacuum polarisation density matrix is then obtained using Eq. (4.14),

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}}^{\text{vp},(1)}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{n}}_1^{\text{vp},(1)}(p + k/2, p - k/2) dp \\ &= \frac{Z}{(2\pi)^{3/2} c} \mathbf{I}_2 + \hat{\mathbf{n}}_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(k),\end{aligned}$$

which contains a diagonal constant contribution and a regular contribution, which goes to zero as $k \rightarrow \infty$,

$$\hat{\mathbf{n}}_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(k) = -\frac{Zm}{(2\pi)^{3/2} h_k} \begin{bmatrix} \frac{4mc}{k} \operatorname{arctanh}\left(\frac{k}{h_k}\right) & \log\left(\frac{h_k - k}{h_k + k}\right) \\ -\log\left(\frac{h_k - k}{h_k + k}\right) & \frac{4mc}{k} \operatorname{arctanh}\left(\frac{k}{h_k}\right) \end{bmatrix},$$

with $h_k = \sqrt{k^2 + 4m^2 c^2}$. In position space, the local Uehling vacuum polarisation density matrix becomes

$$\mathbf{n}^{\text{vp},(1)}(x) = \frac{Z}{2\pi c} \delta(x) \mathbf{I}_2 + \mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x),$$

where the regular contribution can be expressed, for $x \neq 0$, as (see [AT23, Appendix D])

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x) &= -\frac{Z}{4c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} e^{-2\kappa(iu)|x|} \\ &\quad \times \begin{bmatrix} g(iu)^2 + 1 & -i \operatorname{sign}(x) [g(iu) + g(-iu)] \\ i \operatorname{sign}(x) [g(iu) + g(-iu)] & g(-iu)^2 + 1 \end{bmatrix},\end{aligned}$$

with $\kappa(iu) = \sqrt{m^2 c^4 + u^2}/c$. Finally, the Uehling vacuum polarisation density $n^{\text{vp},(1)} = \operatorname{Tr} [\mathbf{n}^{\text{vp},(1)}]$ (where Tr denotes the trace of a 2×2 matrix) has the following form:

$$n^{\text{vp},(1)}(x) = \frac{Z}{\pi c} \delta(x) + n_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x), \quad (4.16)$$

where the regular contribution was calculated in [AT23] as being equal to

$$n_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}(x) = -\frac{Zm}{\pi} \int_1^{\infty} \frac{e^{-2mc|x|t}}{t\sqrt{t^2 - 1}} dt.$$

Note that $n^{\text{vp},(1)}$ represents an opposite charge density (or electron excess density). The vacuum polarisation charge density is the opposite: $\rho^{\text{vp},(1)}(x) = -n^{\text{vp},(1)}(x)$. The Dirac delta contribution in Eq. (4.16) was missed in [AT23], in which the calculation was entirely done in position space. The present calculation in momentum space is more suited to

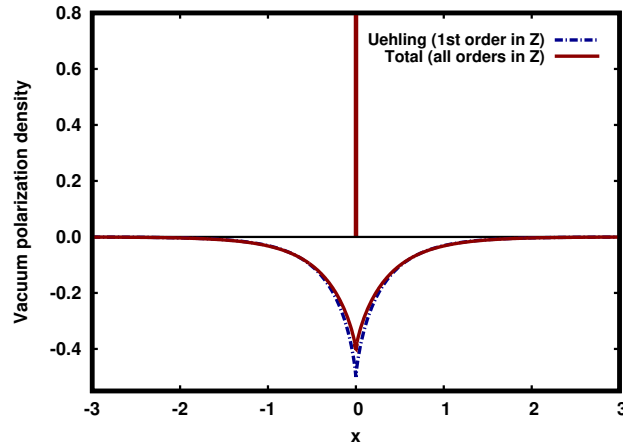


Figure 4.1 – The Uehling vacuum polarisation density $n^{\text{vp},(1)}$ (given by (4.16)) and the total one n^{vp} (given by (4.17)) for $m = c = Z = 1$. The vertical line represents a Dirac delta function.

correctly catching the Dirac delta contribution. The coefficient in front of the Dirac delta function is exactly the opposite of the spatial integral of the regular contribution $n_{\text{reg}}^{\text{vp},(1)}$, so that the total Uehling vacuum polarisation density integrates to zero, i.e.

$$\int_{-\infty}^{\infty} n^{\text{vp},(1)}(x) dx = 0.$$

The overall shape of the present Uehling vacuum polarisation density, represented in Fig. 4.1, is consistent with its usual interpretation as the spatial distribution of virtual electron-positron pairs induced by the nuclear charge (see, e.g., [Sak99]), i.e. there is an excess of electrons around the nucleus (corresponding to the Dirac delta contribution) and an excess of positrons distributed farther away (associated to the regular contribution).

We emphasise that, in the present 1D model, the Uehling vacuum polarisation density can be obtained without performing any regularisation nor renormalisation. This is in sharp contrast with the case of the 3D hydrogen-like atom for which there is a contribution to the first order vacuum polarisation density that diverges in momentum space and which is eliminated by charge renormalisation. The Uehling vacuum polarisation density is then only the remaining contribution after renormalisation (see, e.g., [HS03; GR09]). This remaining 3D Uehling vacuum polarisation density integrates to zero [GR09; Hai04], as in the present 1D model. However, in the 3D hydrogen-like atom, the Uehling vacuum polarisation density (after charge renormalisation) has a shape which is the opposite of the one obtained in the present 1D model, i.e. there is an excess of positrons around the nucleus and an excess of electrons farther away [GR09]. This shape of the Uehling vacuum polarisation density in the 3D hydrogen-like atom may seem counterintuitive but one has to keep in mind that it comes after charge renormalisation which has eliminated an (infinite) excess of electrons around the nucleus.

Total vacuum polarisation density

The case of the total vacuum polarisation density (i.e., at all orders in Z) is more complicated to study since we have not managed to perform the integral in Eq. (4.13) analytically. Nevertheless, by a mixed analytical-numerical study, we have been able to

determine that the Fourier transform of the total vacuum polarisation density matrix has the form

$$\hat{\mathbf{n}}^{\text{VP}}(k) = \frac{\mathcal{N}_0^{\text{VP}}}{2\sqrt{2\pi}} \mathbf{I}_2 + \hat{\mathbf{n}}_{\text{reg}}^{\text{VP}}(k),$$

with a diagonal constant contribution involving the quantity

$$\mathcal{N}_0^{\text{VP}} = \frac{Z/c}{\pi \left(1 + (Z/2c)^2\right)},$$

and a regular contribution (which goes to zero as $k \rightarrow \infty$) which, in practice, can be obtained by inverting the order of the integrals in (4.13) and (4.14), leading to

$$\hat{\mathbf{n}}_{\text{reg}}^{\text{VP}}(k) = -\frac{Z}{\sqrt{2\pi}c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} \frac{z_1(iu) B_1(k, u) + z_2(iu) B_2(k, u)}{\kappa(iu) (k^2 c^2 + 4m^2 c^4 + 4u^2)},$$

with the matrices

$$B_1(k, u) = \begin{bmatrix} (mc^2 + iu)^2 & -kc(mc^2 + iu)/2 \\ kc(mc^2 + iu)/2 & m^2 c^4 + u^2 \end{bmatrix}$$

and

$$B_2(k, u) = \begin{bmatrix} m^2 c^4 + u^2 & -kc(mc^2 - iu)/2 \\ kc(mc^2 - iu)/2 & (mc^2 - iu)^2 \end{bmatrix}.$$

In position space, the total vacuum polarisation density matrix is

$$\mathbf{n}^{\text{VP}}(x) = \frac{\mathcal{N}_0^{\text{VP}}}{2} \delta(x) \mathbf{I}_2 + \mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{VP}}(x),$$

where the regular contribution can be expressed, for $x \neq 0$, as (see [AT23, Appendix D])¹

$$\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{VP}}(x) = -\frac{Z}{4c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} e^{-2\kappa(iu)|x|} [z_1(iu) C_1(x, u) + z_2(iu) C_2(x, u)],$$

with the matrices

$$C_1(x, u) = \begin{bmatrix} g(iu)^2 & -i \text{sign}(x) g(iu) \\ i \text{sign}(x) g(iu) & 1 \end{bmatrix}$$

and

$$C_2(x, u) = \begin{bmatrix} 1 & -i \text{sign}(x) g(-iu) \\ i \text{sign}(x) g(-iu) & g(-iu)^2 \end{bmatrix}.$$

Finally, the total vacuum polarisation density $n^{\text{VP}} = \text{Tr}[\mathbf{n}^{\text{VP}}]$ has the form

$$n^{\text{VP}}(x) = \mathcal{N}_0^{\text{VP}} \delta(x) + n_{\text{reg}}^{\text{VP}}(x), \quad (4.17)$$

where the regular part $n_{\text{reg}}^{\text{VP}} = \text{Tr}[\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{VP}}]$ was given in different forms in [NB86; AT23]. Again, the reason why the Dirac delta contribution was missed in [NB86; AT23] is that these references focused on pointwise calculations of the vacuum polarisation density in position space. The present momentum space approach avoids this limitation.

1. An equivalent alternative expression of $\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{VP}}$ was also given in [AT23, Eq. (66)]. In the latter equation, a sign function was missing in the off-diagonal elements of $\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{VP}}$.

The form of the total vacuum polarisation density is very similar to the one of the Uehling vacuum polarisation density, as shown in Fig. 4.1. However, an important difference is that, for $Z \neq 0$, the total vacuum polarisation density does not integrate to zero,

$$\mathcal{N}^{\text{vp}} = \int_{-\infty}^{\infty} n^{\text{vp}}(x) dx = \mathcal{N}_0^{\text{vp}} + \mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}} \neq 0,$$

where the integral of the regular contribution is [NB86; AT23]

$$\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}} = \int_{-\infty}^{\infty} n_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x) dx = -\frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{Z}{2c}\right). \quad (4.18)$$

We may define the effective nuclear charge observed at a distance d from the nucleus as

$$Z_{\text{obs}}(d) = Z - \int_{-d}^d n^{\text{vp}}(x) dx,$$

such that the following limits hold:

$$\lim_{d \rightarrow 0^+} Z_{\text{obs}}(d) = Z - \mathcal{N}_0^{\text{vp}} \leq Z$$

and

$$\lim_{d \rightarrow \infty} Z_{\text{obs}}(d) = Z - \mathcal{N}^{\text{vp}} = Z_{\text{ren}} \geq Z.$$

Thus, at short distances d the vacuum polarisation density screens the nuclear charge, resulting in an observed nuclear charge $Z_{\text{obs}}(d)$ which is smaller than the bare nuclear charge Z . At large distances d from the nucleus ($d \gg \lambda$ where $\lambda = 1/(mc)$ is the reduced Compton wavelength providing a measure of the spatial extension of the vacuum polarisation density), the observed nuclear charge $Z_{\text{obs}}(d)$ is larger than the bare nuclear charge Z . According to the definition of charge renormalisation proposed in [Hai+07], the observed nuclear charge at large distance defines the renormalised nuclear charge Z_{ren} . Therefore, by contrast with the case of the 3D hydrogen-like atom, the present 1D model exhibits only a charge renormalisation, without any dependence on an ultraviolet cut-off. Moreover, whereas in the 3D case the charge renormalisation is entirely due to the first-order term in the expansion of the vacuum polarisation density in Z , in the present 1D model the charge renormalisation is only due to the vacuum polarisation density beyond the first-order contribution. In analogy with the 3D case, the renormalised vacuum polarisation density may be defined as

$$n_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) = -\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}} \delta(x) + n_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x), \quad (4.19)$$

where the coefficient in front of the delta contribution is chosen so as to make the integral of the renormalised vacuum polarisation density vanish, i.e. $\int_{-\infty}^{\infty} n_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) dx = 0$. Likewise, the renormalised local vacuum polarisation density matrix may be defined as

$$\mathbf{n}_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) = -\frac{\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}}}{2} \delta(x) \mathbf{I}_2 + \mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x). \quad (4.20)$$

The finite charge renormalisation found in the present model is significantly different from the charge renormalisation performed in the 3D case with an ultraviolet cut-off (see, e.g., [Hai+07]). Indeed, we believe that the fact that \mathcal{N}^{vp} is not zero (and not even an integer) in the present model should be understood as an example of fermion number fractionalisation, which is a phenomenon known to appear for 1D Dirac equations with

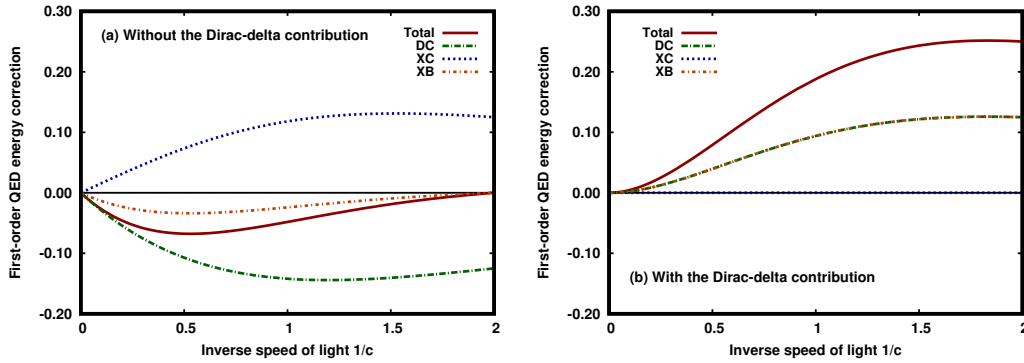


Figure 4.2 – First-order QED corrections to the bound state energy (see Eq. (4.21)) for $m = Z = 1$, as a function of the inverse speed of light $1/c$, using the renormalised local vacuum polarisation density matrix in (4.20) (a) without the Dirac delta contribution $-\left(\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}}/2\right)\delta(x)\mathbf{I}_2$ and (b) with the Dirac delta contribution. The total correction, as well as the direct Coulomb-type (DC) (see (4.22)), the exchange Coulomb-type (XC) (Eq. (4.23)) and the exchange Breit-type (XB) (Eq. (4.25)) contributions are shown. On plot (a), the curve DC is identical to the one in [AT23, Fig. 3] but the curves XC and XB are different since there was an error in the off-diagonal elements of the expression of $\mathbf{n}_{\text{reg}}^{\text{vp}}(x)$ given in [AT23], as already previously explained.

soliton-type potentials (see, e.g., [GW81; NS86; KR87; RSP08]). The non-zero value of the fermion number is related to the infrared limit [KS82; RB82; Nog08]. Notice, in particular, that the expression of $\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}}$ in Eq. (4.18) has the general form of the fermion number found in soliton models [GW81; NS86]. Also, we may note that, in the present model, for $Z = 2c$ the (unoccupied) bound state has zero energy so that the spectrum of \mathfrak{D}_Z is charge-conjugation symmetric and $\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}}$ reduces to $-1/2$, which is similar to the soliton scenario studied in [JR76] (see, also, [RSP08]).

In [AT23, Section III.D and Appendix E], it was attempted to calculate the charge of the vacuum of the present model using the notion of " P^0 -trace" given in [HLS05a; Hai+07; GLS09]. A rough numerical integration suggested the P^0 -trace formula of the charge of the vacuum to be equal to zero, similarly to what is obtained in the 3D case in the presence of an ultraviolet cut-off. However, after performing a more careful numerical integration, we can claim that the P^0 -trace formula of the (opposite) charge of the vacuum is numerically identical to the integral of the vacuum polarisation density, i.e. the fractional fermion number \mathcal{N}^{vp} . The fact that the P^0 -trace formula of the charge of the vacuum is not an integer implies that the vacuum polarisation density matrix $\hat{\mathbf{n}}_1^{\text{vp}}$ in (4.13) of the present model is not a Hilbert-Schmidt operator (see [HLS05a; Hai+07]). According to the Shale-Stinespring theorem [SS65; Tha92], this implies in turn that the polarised vacuum state of the present model cannot be reached from a unitary transformation of the free vacuum state in the second-quantised Fock space (see, also, [FG87; GO87]).

2.3 QED corrections to the bound state energy

In the present 1D hydrogen-like Dirac model, we can calculate the shift of the bound state energy due to the phenomenon of vacuum polarisation, similarly to the Lamb shift in standard QED (see, e.g., [MPS98; SSS22]). The analogue of the 3D Coulomb-Breit

two-particle interaction in the present model is [CN87; AT23]

$$w(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2) (\mathbf{I}_2 \otimes \mathbf{I}_2 - \sigma_1 \otimes \sigma_1),$$

where the two terms are the 1D analogues of the Coulomb and Breit interactions respectively (see, e.g., [DF07; RW09; Tou21]). Notice that, in 1D, the Breit interaction exactly reduces to the magnetic Gaunt interaction [AT23]. At first order with respect to the two-particle interaction, the QED correction to the bound state energy contains four contributions [AT23]:

$$\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1)}} = \mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),DC}} + \mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),XC}} + \mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),DB}} + \mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),XB}}. \quad (4.21)$$

The direct Coulomb-type (DC) and exchange Coulomb-type (XC) contributions are

$$\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),DC}} = \int_{-\infty}^{\infty} n^{\text{el}}(x) n_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) dx \quad (4.22)$$

and

$$\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),XC}} = - \int_{-\infty}^{\infty} \text{Tr} [\mathbf{n}^{\text{el}}(x) \mathbf{n}_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x)] dx, \quad (4.23)$$

where $\mathbf{n}^{\text{el}} = \psi_b \psi_b^*$ is the local electronic bound state density matrix and $n^{\text{el}} = \text{Tr} [\mathbf{n}^{\text{el}}]$ is its associated density. The direct Breit-type (DB) and exchange Breit-type (XB) contributions are

$$\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),DB}} = - \frac{1}{c^2} \int_{-\infty}^{\infty} j^{\text{el}}(x) j_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) dx \quad (4.24)$$

and

$$\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),XB}} = \frac{1}{c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Tr} [\mathbf{j}^{\text{el}}(x) \mathbf{j}_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x)] dx, \quad (4.25)$$

where $\mathbf{j}^{\text{el}} = c\sigma_1 \mathbf{n}^{\text{el}}$ and $\mathbf{j}_{\text{ren}}^{\text{vp}} = c\sigma_1 \mathbf{n}_{\text{ren}}^{\text{vp}}$ are the local electronic bound state and renormalised vacuum polarisation current density matrices, and $j^{\text{el}} = \text{Tr} [\mathbf{j}^{\text{el}}]$ and $j_{\text{ren}}^{\text{vp}} = \text{Tr} [\mathbf{j}_{\text{ren}}^{\text{vp}}]$ are their associated current densities. By time-reversal symmetry, the current densities vanish, i.e. $j^{\text{el}}(x) = j_{\text{ren}}^{\text{vp}}(x) = 0$ (see, e.g., [SS23]) and thus the DB contribution is zero, i.e. $\mathcal{E}_b^{\text{vp,(1),DB}} = 0$.

Fig. 4.2 reports these QED corrections to the bound state energy as a function of the inverse speed of light $1/c$, using the renormalised local vacuum polarisation density matrix in (4.20) without and with the Dirac delta contribution $-(\mathcal{N}_{\text{reg}}^{\text{vp}}/2) \delta(x) \mathbf{I}_2$. Whereas the total first-order QED correction is negative without the Dirac delta contribution, it becomes positive after adding the Dirac delta contribution. Thus, the total effect of the vacuum polarisation in the present model is to destabilise the bound state energy. We note that, for the 3D hydrogen-like atom, the total QED energy correction on the ground state energy is also positive, i.e. the ground state is also destabilised (see, e.g., [IGS01]). Concerning the different contributions to the total QED energy correction in the present model, we observe the a priori unexpected fact that, when using the renormalised local vacuum polarisation density matrix, the XC contribution vanishes and the DC and XB contributions are equal.

3 Finite dimensional approximation to the 1D hydrogen-like Dirac model

In this section, we study the 1D hydrogen-like Dirac model using a finite plane wave basis.

3.1 Calculations in a finite plane wave basis

We consider a finite dimensional approximation of the Hilbert space with an infrared (IR) cut-off L and an ultraviolet (UV) cut-off Λ ,

$$\mathfrak{h}_{L,\Lambda} = \text{span} \left(\left\{ \chi_n^L \right\}_{|n| \leq n_{\max}} \cup \left\{ \chi_n^S \right\}_{|n| \leq n_{\max}} \right),$$

which is spanned by a basis of large and small component plane wave functions $\chi_n^L, \chi_n^S : [-L/2, L/2] \rightarrow \mathbb{C}^2$

$$\chi_n^L(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{bmatrix} e^{ik_n x} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \chi_n^S(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{bmatrix} 0 \\ e^{ik_n x} \end{bmatrix},$$

with $k_n = 2\pi n/L$ and $n_{\max} = \lfloor L\Lambda/(2\pi) \rfloor$. Physically, it corresponds to an electron on the interval $[-L/2, L/2]$ with maximal momentum $|k_{n_{\max}}| \leq \Lambda$. Ultimately, we will be interested in the limits $L \rightarrow \infty$ and $\Lambda \rightarrow \infty$.

Using Eq. (4.7), the 1D hydrogen-like Dirac eigenvalue equation, $\mathfrak{D}_Z \psi_p^Z = \varepsilon_p^Z \psi_p^Z$, on this finite dimensional Hilbert space leads to the following matrix eigenvalue equation:

$$\begin{bmatrix} mc^2 \mathbf{I} + \mathbf{V} & c\mathbf{P} \\ c\mathbf{P} & -mc^2 \mathbf{I} + \mathbf{V} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_p^L \\ \mathbf{c}_p^S \end{bmatrix} = \varepsilon_p^Z \begin{bmatrix} \mathbf{c}_p^L \\ \mathbf{c}_p^S \end{bmatrix}, \quad (4.26)$$

where \mathbf{c}_p^L and \mathbf{c}_p^S are $(2n_{\max} + 1)$ -component vectors, and \mathbf{I} , \mathbf{P} , and \mathbf{V} are $(2n_{\max} + 1) \times (2n_{\max} + 1)$ matrices with elements:

$$\mathbf{I}_{n,m} = \langle \chi_n^L, \chi_m^L \rangle_L = \langle \chi_n^S, \chi_m^S \rangle_L = \delta_{n,m},$$

$$\mathbf{P}_{n,m} = \langle \chi_n^L, \sigma_1 p_x \chi_m^S \rangle_L = \langle \chi_n^S, \sigma_1 p_x \chi_m^L \rangle_L = k_n \delta_{n,m}$$

and

$$\mathbf{V}_{n,m} = -Z \chi_n^{L*}(0) \chi_m^L(0) = -Z \chi_n^{S*}(0) \chi_m^S(0) = -\frac{Z}{L},$$

where $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$ denotes here the standard inner product in $L^2([-L/2, L/2], \mathbb{C}^2)$. Note that, since $\sigma_1 p_x \chi_n^L = k_n \chi_n^S$ and $\sigma_1 p_x \chi_n^S = k_n \chi_n^L$, the plane wave basis satisfies the kinetic balance condition in all its variants (see, e.g., [SH84; Kut84; Sha+04; SLK11; SS20; GQ22; SS23]). This ensures that, as $c \rightarrow \infty$, the non-relativistic limit with the same basis is correctly reached. Moreover, by analogy to the 3D case, since the plane wave basis is adapted to the free Dirac operator \mathfrak{D}_m^0 , it is expected to avoid any spectral pollution [LS09; LS14].

After solving Eq. (4.26), we obtain $4n_{\max} + 2$ eigenfunctions of the form

$$\psi_p^Z(x) = \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} c_{p,n}^L \chi_n^L(x) + \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} c_{p,n}^S \chi_n^S(x), \quad (4.27)$$

which can be partitioned into a set of positive energy states (PS) $\{\psi_p^Z\}_{p \in \text{PS}}$ and a set of

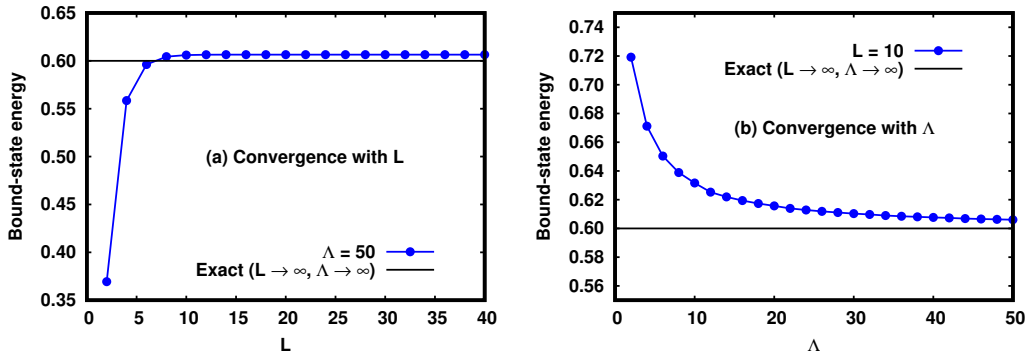


Figure 4.3 – Convergence of the bound state energy of the 1D hydrogen-like Dirac model with a plane wave basis as a function of (a) the IR cut-off L and (b) the UV cut-off Λ for $m = c = Z = 1$. The exact value in the limits $L \rightarrow \infty$ and $\Lambda \rightarrow \infty$ is $\varepsilon_b = 0.6$.

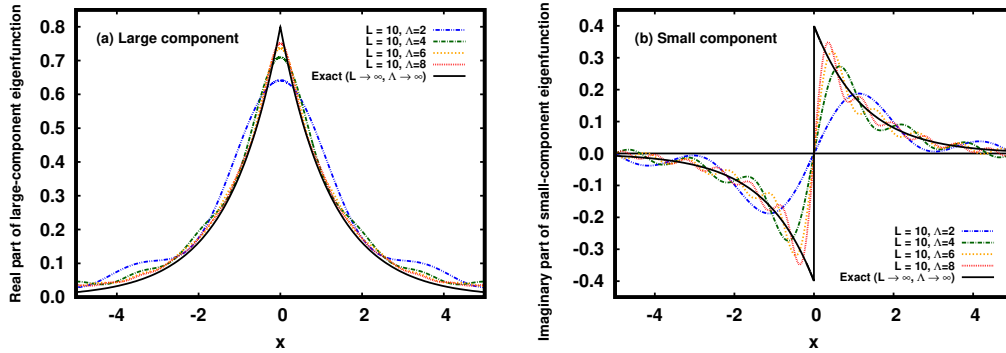


Figure 4.4 – Convergence of the (a) large component and (b) small component of the bound state eigenfunction of the 1D hydrogen-like Dirac model with a plane wave basis as a function of the UV cut-off Λ for an IR cut-off $L = 10$ and $m = c = Z = 1$. The exact eigenfunction (given in (4.6)) corresponds to the limits $L \rightarrow \infty$ and $\Lambda \rightarrow \infty$.

negative energy states (NS) $\{\psi_p^Z\}_{p \in \text{NS}}$. The local vacuum polarisation density matrix can then be calculated, for a given IR cut-off L and UV cut-off Λ , as

$$\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = \sum_{p \in \text{NS}} \psi_p^Z(x) \psi_p^{Z*}(x) - \sum_{p \in \text{NS}} \psi_p^0(x) \psi_p^{0*}(x),$$

where $\{\psi_p^0\}$ are the eigenfunctions for $Z = 0$ calculated in the same basis. The corresponding vacuum polarisation density is $n_{L,\Lambda}^{\text{VP}} = \text{Tr}[\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}]$.

3.2 Convergence of the bound state energy and eigenfunction

Fig. 4.3 reports the convergence of the bound state energy as a function of the IR cut-off L and the UV cut-off Λ . As $L \rightarrow \infty$ and $\Lambda \rightarrow \infty$, the bound state energy calculated in the plane wave basis correctly converges to the exact value in (4.5). This supports the fact that the basis calculations based on Eq. (4.7) corresponds to the self-adjoint realisation of the Hamiltonian \mathcal{D}_Z that we have selected via Eqs. (4.2) - (4.4). Numerically, we find that the bound state energy converges exponentially as $L \rightarrow \infty$ and roughly as $1/\Lambda$ as $\Lambda \rightarrow \infty$. This is expected based on the theoretical analysis in Appendix C..

Fig. 4.4 reports the convergence of the large and small components of the bound

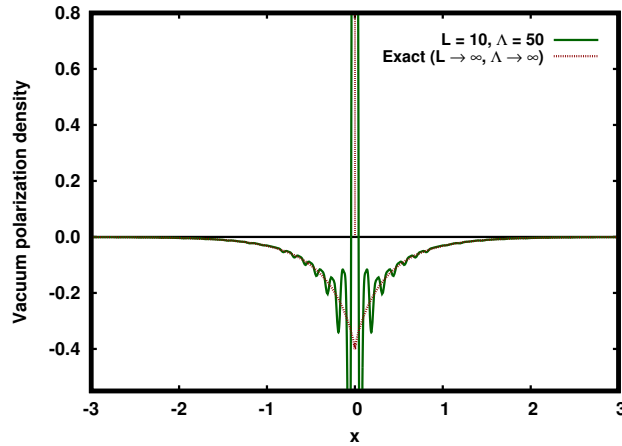


Figure 4.5 – The exact total vacuum polarisation density (see (4.20)) and the one calculated with a plane wave basis for a IR cut-off $L = 10$ and a UV cut-off $\Lambda = 50$ (Eq. (4.27)), for $m = c = Z = 1$.

state eigenfunction as a function of the IR cut-off L and the UV cut-off Λ . The large component of the exact eigenfunction (see Eq. (4.6)) has a derivative discontinuity at $x = 0$, and consequently the convergence with respect to Λ is slow around $x = 0$. The small component of the exact eigenfunction (see Eq. (4.6)) has a discontinuity at $x = 0$, in addition to having the same derivative discontinuity at $x = 0$ as the large component, and consequently the convergence with respect to Λ around $x = 0$ is even slower than for the large component. Notice that this discontinuity at $x = 0$ of the exact small component eigenfunction cannot be reproduced in the finite plane wave basis, since the expansion of an odd function in a basis of continuous functions necessarily gives zero at $x = 0$. This implies that the finite plane wave basis always incorrectly gives a vanishing small component contribution to the bound state density at $x = 0$. As seen from the analysis in Appendix C., the convergence of the small component eigenfunction is the limiting factor in the convergence of the bound state energy as $\Lambda \rightarrow \infty$. Naively, this latter fact might lead one to think that a faster convergence of the bound state energy with respect to Λ would be obtained in the non-relativistic limit since only the large component survives in this limit. In fact, it can be shown that, in the non-relativistic limit, the bound state energy still converges as $1/\Lambda$ as $\Lambda \rightarrow \infty$. This is because the non-relativistic Hamiltonian involves now the second-order derivative of the large component eigenfunction (see, also, [TGT22] for a related discussion on the basis convergence of the non-relativistic bound state energy).

3.3 Convergence of the vacuum polarisation density

We now discuss the convergence of the total vacuum polarisation density $n_{L,\Lambda}^{\text{vp}}$ calculated from Eq. (4.27) with a finite plane wave basis. Since in our finite plane wave basis we obtain the same number of negative energy states for a non-vanishing nuclear charge $Z < 2c$ and for $Z = 0$, the total vacuum polarisation density necessarily integrates to zero in the basis set for any finite cut-offs L and Λ , i.e. $\int_{-\infty}^{\infty} n_{L,\Lambda}^{\text{vp}}(x) dx = 0$. We can thus consider that the basis set calculation does not give an approximation to the total vacuum polarisation density in (4.17), which does not integrate to zero, but rather it gives directly an approximation to the renormalised total vacuum polarisation density in (4.19), which does integrate to zero.

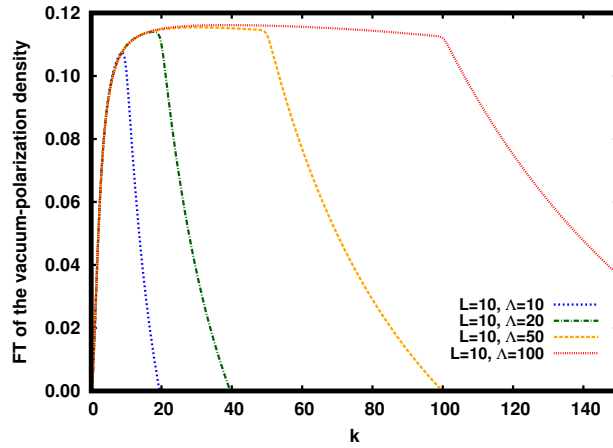


Figure 4.6 – Fourier transform of the total vacuum polarisation density calculated with a plane wave basis (see (4.28)) for a IR cut-off $L = 10$ and different UV cut-offs Λ for $m = c = Z = 1$.

The total vacuum polarisation density $n_{L,\Lambda}^{\text{VP}}$ calculated with a plane wave basis with a IR cut-off $L = 10$ and a UV cut-off $\Lambda = 50$ is reported in Fig. 4.5 and compared with the exact one (given in (4.19)). The plane wave basis calculation reproduces well the vacuum polarisation density for x large enough. However, the plane wave basis generates large oscillations around $x = 0$ because of the Dirac delta contribution in Eq. (4.19), resulting in an effectively impossible pointwise convergence of the vacuum polarisation density around $x = 0$. To analyse this convergence problem, we report in Fig. 4.6 the Fourier transform of the total vacuum polarisation density calculated with the plane wave basis,

$$\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L/2}^{L/2} n_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) e^{-ikx} dx. \quad (4.28)$$

In order to reproduce the Dirac delta contribution to the vacuum polarisation density in position space, $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k)$ should tend to a constant as $k \rightarrow \infty$. However, with a finite UV cut-off Λ , the Fourier transform $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k)$ is only able to approximately attain a constant for $k \lesssim \Lambda$, but for $k \gtrsim \Lambda$ quickly decays to be equal to zero at $k = 2\Lambda$. This suggests the following simple scheme to extract the regular part of the vacuum polarisation density in a finite basis. For given L and Λ , we select a maximal momentum k_{max} and truncate $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) - \hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k_{\text{max}})$ for $|k| > k_{\text{max}}$, i.e.

$$\hat{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) = \left[\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) - \hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k_{\text{max}}) \right] \theta(k_{\text{max}} - |k|). \quad (4.29)$$

By construction, $\hat{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(k)$ is thus zero for $|k| > k_{\text{max}}$. In practice, we choose for k_{max} the value of k at which $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}$ reaches its maximum, i.e.

$$k_{\text{max}} = \underset{k \in [0, 2\Lambda]}{\text{argmax}} \hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k). \quad (4.30)$$

The values of k_{max} obtained in this way are close to Λ . We finally take the inverse Fourier

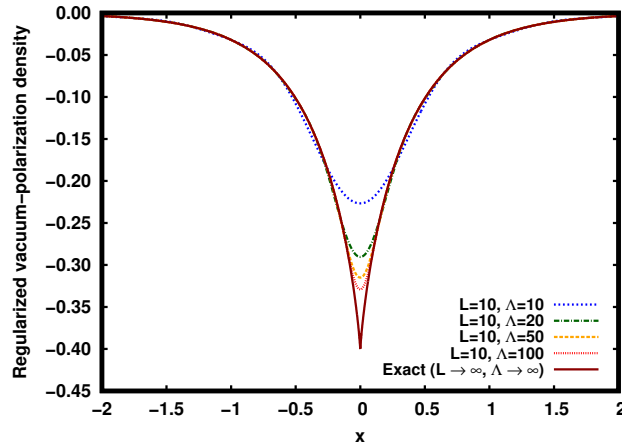


Figure 4.7 – Regularised total vacuum polarisation density (given in (4.31)) for $m = c = Z = 1$, calculated in a plane wave basis for a IR cut-off $L = 10$ and different UV cut-offs Λ , compared to the exact regular part of the total vacuum polarisation density.

transform of $\hat{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}$, i.e.

$$n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-k_{\text{max}}}^{k_{\text{max}}} \hat{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) e^{ikx} dk, \quad (4.31)$$

resulting in a regularised vacuum polarisation density where the approximation of the Dirac delta contribution in the finite basis has been removed. This quantity should then converge to the regular part of the total vacuum polarisation density as $L \rightarrow \infty$ and $\Lambda \rightarrow \infty$, i.e. $\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = n_{\text{reg}}^{\text{VP}}(x)$. Moreover, from the value $\hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k_{\text{max}})$, we get directly the integral of $n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}} &= \int_{-L/2}^{L/2} n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) dx \\ &= \sqrt{2\pi} \hat{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(0) \\ &= -\sqrt{2\pi} \hat{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k_{\text{max}}). \end{aligned}$$

The renormalised total vacuum polarisation density in Eq. (4.19) can thus be approximated from the finite basis calculation as

$$n_{\text{ren},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = -\mathcal{N}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}} \delta(x) + n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x).$$

The regularised vacuum polarisation density $n_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}$ obtained by the above scheme is reported in Fig. 4.7 for different UV cut-offs Λ . We see that our regularisation scheme has properly eliminated the large oscillations around $x = 0$ and the regularised vacuum polarisation density converges indeed toward the regular part of the exact vacuum polarisation density as the UV cut-off is increased. This convergence remains however slow near to $x = 0$ due to the fact that the regular part of the exact vacuum polarisation density has an infinite derivative discontinuity at $x = 0$.

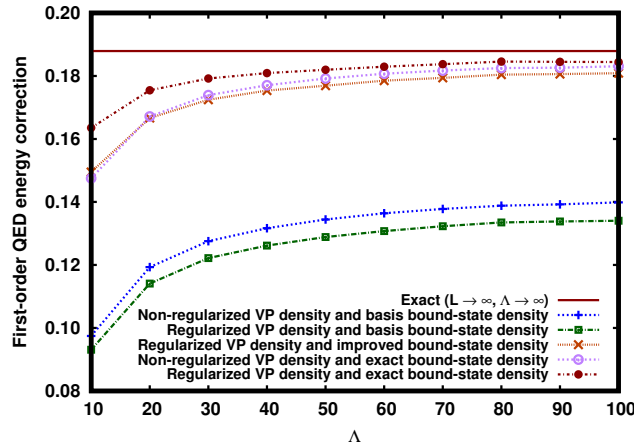


Figure 4.8 – Convergence of the first-order QED correction to the bound state energy calculated in a plane wave basis as a function of the UV cut-off Λ for a IR cut-off $L = 10$ and for $m = c = Z = 1$, using either the non-regularised vacuum polarisation density matrix $\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}$ (see (4.27)) or the regularised renormalised vacuum polarisation density matrix $\mathbf{n}_{\text{ren},L,\Lambda}^{\text{VP}}$ (Eq. (4.32)), together with either the finite basis bound state density matrix $\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{el}}$ or a version of it with an improved density at $x = 0$ (see Section 3.4) or the exact bound state density matrix \mathbf{n}^{el} .

3.4 Convergence of the QED correction to the bound state energy

In Fig. 4.8, we report the convergence of the total first-order QED correction to the bound state energy in (4.21) calculated in different ways in the plane wave basis as a function of the UV cut-off Λ . The first and most straightforward way of calculating this QED correction is to use in Eqs. (4.22) - (4.25) the non-regularised vacuum polarisation density matrix $\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}$ given by (4.27) for given cut-offs L and Λ , together with the bound state electronic density matrix $\mathbf{n}_{L,\Lambda}^{\text{el}}$ calculated with the same cut-offs. The QED correction calculated in this way not only converges slowly with respect to Λ but does not even seem to tend toward the exact value. The second way of calculating the QED correction is to approximate the renormalised local vacuum polarisation density matrix in (4.20) by

$$\mathbf{n}_{\text{ren},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x) = -\frac{\mathcal{N}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}}{2}\delta(x)\mathbf{I}_2 + \mathbf{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(x), \quad (4.32)$$

where $\mathbf{n}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}$ is a regularised local vacuum polarisation density matrix that we define in momentum space similarly to (4.29) as

$$\hat{\mathbf{n}}_{\text{reg},L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) = \left[\hat{\mathbf{n}}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k) - \hat{\mathbf{n}}_{L,\Lambda}^{\text{VP}}(k_{\text{max}}) \right] \theta(k_{\text{max}} - |k|),$$

using the same value for k_{max} as the one used for the vacuum polarisation density (see Eq. (4.30)). It turns out that the QED correction calculated in this way does not converge any faster and is in fact for finite Λ slightly further away from the exact value than the QED correction calculated with the non-regularised local vacuum polarisation density matrix.

The large errors on the QED correction of the bound state energy observed for finite Λ both when using the non-regularised and regularised local vacuum polarisation density matrices actually come from a too poor description of the bound state density matrix in the

finite plane wave basis and in particular an incorrect value of the bound state density at the origin. Indeed, as mentioned in Section 3.2, the finite plane wave basis gives an incorrect vanishing small component contribution to the bound state energy, which largely affects the QED correction to the bound state energy. A better estimate of the small component bound state density at $x = 0$ is given by a maximal value of the small component bound state density, which is reached in a neighbourhood of the origin, but not at the origin. We can then use this improved estimate for the bound state density at $x = 0$ so as to calculate the delta contribution to the QED correction when using the regularised local vacuum polarisation density matrix in (4.32). The resulting QED correction calculated in this way, reported in Fig. 4.8, has much smaller errors for any finite Λ . Finally, in Fig. 4.8, we also show the QED correction to the bound state energy calculated with the exact bound state density matrix \mathbf{n}^{el} and with either the non-regularised or the regularised local vacuum polarisation density matrix. The obtained curves are quite similar to the one obtained with the improved bound state density at the origin.

4 Conclusion

In this work, we have reexamined the 1D effective QED model of the hydrogen-like atom with delta potential interactions. We have provided some mathematical details on the definition of this model. We have calculated the exact vacuum polarisation density and density matrix, using momentum space Green function techniques, showing that a Dirac delta contribution was missed in previous calculations. We have calculated the resulting Lamb shift of the bound state energy. We have also studied the approximation of this model in a finite plane wave basis, in particular the basis convergence of the bound state energy and eigenfunction, of the vacuum polarisation density as well as of the Lamb shift of the bound state energy. We have shown that it is difficult to make the vacuum polarisation density converge with respect to the UV momentum cut-off in the plane wave basis due to the presence of the Dirac delta contribution. We have proposed a way of filtering out in momentum space this Dirac delta contribution in the plane wave calculations in order to converge the regular part of the vacuum polarisation density in the basis.

We believe that the present work may give some hints on how to perform finite basis calculations of the vacuum polarisation density of atoms and molecules in the 3D effective QED theory with Coulomb interactions. Indeed, for atoms and molecules, the calculation of the vacuum polarisation density in a finite basis presents similar problems as in the present 1D model. For instance, the vacuum polarisation density of an atom with a point charge nucleus also contains a Dirac delta contribution at the nucleus (see, e.g., [HS03; GR09]). A similar regularisation technique in momentum space as the one used in the present work may be therefore useful in this case as well. We hope to confirm this in a future work.

Appendix A. Matrix elements of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian

In this appendix, we argue that the matrix elements of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian \mathfrak{D}_Z can be defined on a set of functions larger than its domain.

We start from the definition of the Hamiltonian \mathfrak{D}_Z as having the same action of the free Dirac Hamiltonian \mathfrak{D}_0 for $x \neq 0$, i.e.

$$\mathfrak{D}_Z \psi = \mathfrak{D}_0 \psi \quad \text{on} \quad \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

with the Z -dependent domain

$$\text{Dom}(\mathfrak{D}_Z) = \left\{ \psi \in H^1(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C}^2) \mid \psi(0^+) = M_Z \psi(0^-) \right\},$$

where the matrix M_Z is defined in (4.4). Let us consider two functions ψ and ϕ in $\text{Dom}(\mathfrak{D}_Z)$. Since they have a discontinuity at $x = 0$, they can be written as, for $x \in \mathbb{R}$,

$$\psi(x) = \psi_-(x) + H(x)[\psi_+(x) - \psi_-(x)] \quad \text{and} \quad \phi(x) = \phi_-(x) + H(x)[\phi_+(x) - \phi_-(x)],$$

where H is the Heaviside step function, and ψ_{\pm} and ϕ_{\pm} are (non-unique) functions in $H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$ such that $\psi_- = \psi$ and $\phi_- = \phi$ on \mathbb{R}^- and $\psi_+ = \psi$ and $\phi_+ = \phi$ on \mathbb{R}^+ . Since they are chosen in $H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$, the functions ψ_{\pm} and ϕ_{\pm} are continuous at $x = 0$ and we have $\psi_{\pm}(0) = \psi(0^{\pm})$ and $\phi_{\pm}(0) = \phi(0^{\pm})$. The matrix element $\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle$ can be written as

$$\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle = \int_{-\infty}^0 \phi_-^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_-(x) dx + \int_0^{\infty} \phi_+^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_+(x) dx. \quad (4.33)$$

We would like to rewrite Eq. (4.33) as a single integral over $(-\infty, +\infty)$ of $\phi^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi(x)$ but the problem is that $\phi^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi(x)$ formally contains a multiplication of distributions, namely the product of a Heaviside step distribution and a Dirac delta distribution, which is meaningless in the standard theory of distributions (where only the product of a distribution by a smooth function is defined). One way around this, in the spirit of Colombeau's generalised functions [Col92; Gro+01; Gsp08; FLB12], is to introduce regularised functions ψ_{ε} and ϕ_{ε} , depending on a regularisation parameter $\varepsilon > 0$,

$$\begin{aligned} \psi_{\varepsilon}(x) &= \psi_-(x) + H_{\varepsilon}(x)[\psi_+(x) - \psi_-(x)], \\ \phi_{\varepsilon}(x) &= \phi_-(x) + H_{\varepsilon}(x)[\phi_+(x) - \phi_-(x)], \end{aligned} \quad (4.34)$$

where $H_{\varepsilon}(x)$ is a regularised Heaviside step function obtained by convoluting H with $\eta_{\varepsilon} : x \mapsto (1/\varepsilon)\eta(x/\varepsilon)$,

$$H_{\varepsilon}(x) = (H * \eta_{\varepsilon})(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} H(x-y) \frac{1}{\varepsilon} \eta\left(\frac{y}{\varepsilon}\right) dy,$$

where η is a mollifier, i.e. a compactly supported smooth real function satisfying $\int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) dx = 1$. The derivative of ψ_{ε} is then

$$\psi'_{\varepsilon}(x) = \psi'_-(x) + H_{\varepsilon}(x)[\psi'_+(x) - \psi'_-(x)] + \delta_{\varepsilon}(x)[\psi_+(x) - \psi_-(x)],$$

where $\delta_{\varepsilon} = H'_{\varepsilon}$ is the corresponding regularised Dirac delta function,

$$\delta_{\varepsilon}(x) = (\delta * \eta_{\varepsilon})(x) = \frac{1}{\varepsilon} \eta\left(\frac{x}{\varepsilon}\right).$$

Obviously, the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ corresponds to the non-regularised case with $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} H_{\varepsilon} = H$ and $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_{\varepsilon} = \delta$ in the sense of distributions. Now, since the regularised functions ψ_{ε} and ϕ_{ε} are in $H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$, we can integrate $\phi_{\varepsilon}^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_{\varepsilon}(x)$ over $(-\infty, +\infty)$ and take the limit $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\varepsilon}^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_{\varepsilon}(x) dx = \langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle + S,$$

where the regular part (not involving a delta function) of the integrand gives the value $\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle$ in (4.33) and the singular part (involving a delta function) of the integrand gives

an additional contribution,

$$S = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} -ic [\phi_-^*(x) + H_\varepsilon(x) [\phi_+^*(x) - \phi_-^*(x)]] \sigma_1 \delta_\varepsilon(x) [\psi_+(x) - \psi_-(x)] dx. \quad (4.35)$$

The difficult term in this expression is the one involving the product $H_\varepsilon(x) \delta_\varepsilon(x)$ that we calculate now for any continuous and integrable function $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$,

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} H_\varepsilon(x) \delta_\varepsilon(x) f(x) dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(x-y) \frac{1}{\varepsilon} \eta\left(\frac{y}{\varepsilon}\right) \frac{1}{\varepsilon} \eta\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) f(x) dx dy \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(x-y) \eta(y) \eta(x) f(\varepsilon x) dx dy \\ &= af(0), \end{aligned} \quad (4.36)$$

where the real number a is given by

$$\begin{aligned} a &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(x-y) \eta(x) \eta(y) dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - H(y-x)] \eta(x) \eta(y) dx dy \\ &= 1 - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H(y-x) \eta(x) \eta(y) dx dy \\ &= 1 - a, \end{aligned}$$

i.e., $a = 1/2$ independently from the mollifier η . We have thus shown that $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} H_\varepsilon \delta_\varepsilon = (1/2) \delta$ in the sense of distributions, which corresponds to the result obtained in Colombeau theory. Note that the value $a = 1/2$ is obtained only if we use the same regularised Heaviside-step function H_ε for both ψ_ε and ϕ_ε in (4.34). Using Eq. (4.36), the term S in (4.35) simplifies to

$$\begin{aligned} S &= -\frac{ic}{2} [\phi_+^*(0) + \phi_-^*(0)] \sigma_1 [\psi_+(0) - \psi_-(0)] \\ &= -\frac{ic}{2} [\phi^*(0^+) + \phi^*(0^-)] \sigma_1 [\psi(0^+) - \psi(0^-)]. \end{aligned}$$

Using now the boundary condition $\psi(0^+) = M_Z \psi(0^-)$ and the matrix identity $-ic\sigma_1 [M_Z - \mathbf{I}_2] = (Z/2) [M_Z + \mathbf{I}_2]$, we can write S as

$$\begin{aligned} S &= -\frac{ic}{2} [\phi^*(0^+) + \phi^*(0^-)] \sigma_1 [M_Z - \mathbf{I}_2] \psi(0^-) \\ &= \frac{Z}{4} [\phi^*(0^+) + \phi^*(0^-)] [M_Z + \mathbf{I}_2] \psi(0^-) \\ &= \frac{Z}{4} [\phi^*(0^+) + \phi^*(0^-)] [\psi(0^+) + \psi(0^-)] \\ &= Z \bar{\phi}^*(0) \bar{\psi}(0), \end{aligned}$$

where we have defined $\bar{\psi}(0) = [\psi(0^+) + \psi(0^-)]/2$ and $\bar{\phi}(0) = [\phi(0^+) + \phi(0^-)]/2$. We thus arrive at the following expression for $\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle$:

$$\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\varepsilon^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_\varepsilon(x) dx - Z \bar{\phi}^*(0) \bar{\psi}(0).$$

If we define the matrix element $\langle \phi, \mathfrak{D}_m^0 \psi \rangle$ using the regularised functions, or equivalently

in Fourier space,

$$\langle \phi, \mathfrak{D}_m^0 \psi \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\varepsilon^*(x) \mathfrak{D}_m^0 \psi_\varepsilon(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\phi}^*(k) [c\sigma_1 k + \sigma_3 m c^2] \hat{\psi}(k) dk,$$

where $\hat{\psi}$ and $\hat{\phi}$ are the Fourier transforms of ψ and ϕ , respectively, we can finally write $\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle$ as

$$\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle = \langle \phi, \mathfrak{D}_m^0 \psi \rangle - Z \bar{\phi}^*(0) \bar{\psi}(0). \quad (4.37)$$

Thus, the potential term in Eq. (4.37) corresponds to interpreting the multiplication of the delta function $\delta(x)$ with a function $\psi(x)$ discontinuous at $x=0$ as $\delta(x)\psi(x) = \bar{\psi}(0)\delta(x)$, as done in [SB72; Lap83; FLB12]. This can also be understood from a distribution theory for discontinuous test functions [KB98]. Using the bound state eigenfunction ψ_b^Z in (4.6), it can be explicitly checked that calculating $\langle \psi_b^Z, \mathfrak{D}_Z \psi_b^Z \rangle$ using Eq. (4.37) gives correctly the bound state energy ε_b^Z in (4.5).

We can now extend (4.37) to functions ψ and ϕ taken from a subspace of the Hilbert space \mathfrak{h} that is larger than $\text{Dom}(\mathfrak{D}_Z)$ and independent from Z (since we have included the information on Z directly in the expression of $\langle \phi, \mathfrak{D}_Z \psi \rangle$). This larger subspace is the form domain of the operator \mathfrak{D}_Z , i.e. the largest domain on which the self-adjoint operator \mathfrak{D}_Z can make sense through Eq. (4.37). The form domain of the free Dirac operator is the fractional Sobolev space $H^{1/2}(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$ (see, e.g., [DPV12] for a review on fractional Sobolev spaces). We thus expect the form domain of the operator \mathfrak{D}_Z to be included in $H^{1/2}(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$.

Appendix B. Approximation of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian with regular potentials

The formal Dirac Hamiltonian with a delta function potential in (4.1) has also been interpreted in various works [CKN87; CN87; MS87b; AD00; Gui+19] as another self-adjoint operator \mathfrak{D}'_ζ corresponding to another boundary condition which has the same form as (4.4) but with θ replaced by $\theta' = \zeta/c$ for $0 \leq \zeta < c\pi$. In this case, Eq. (4.37) becomes

$$\langle \phi, \mathfrak{D}'_\zeta \psi \rangle = \langle \phi, \mathfrak{D}_m^0 \psi \rangle - 2c \tan\left(\frac{\zeta}{2c}\right) \bar{\phi}^*(0) \bar{\psi}(0).$$

This operator \mathfrak{D}'_ζ is thus identical to the operator $\mathfrak{D}_{Z(\zeta)}$ considered in the present work with the nuclear charge $Z(\zeta) = 2c \tan(\zeta/2c)$. The reason why the operator \mathfrak{D}'_ζ is sometimes considered to be a realisation of (4.1) is that, if we take a family of local regular potentials $v_\varepsilon(x) = v(x/\varepsilon)/\varepsilon$ converging (in the distribution sense) to the Dirac delta function $\delta(x)$ as $\varepsilon \rightarrow 0^+$, then the family of Dirac operators $\mathfrak{D}_{\zeta,\varepsilon}^{\text{local}}$ with these local potentials $-\zeta v_\varepsilon$ converges (in the norm-resolvent sense) to \mathfrak{D}'_ζ as $\varepsilon \rightarrow 0^+$ [MS87a; MS87b; CKN87; Šeb89; Hug95; Hug97; Hug99; Tuš20],

$$\mathfrak{D}_{\zeta,\varepsilon}^{\text{local}} = \mathfrak{D}_m^0 - \zeta v_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} \mathfrak{D}'_\zeta = \mathfrak{D}_{Z(\zeta)}.$$

The fact that $\mathfrak{D}_{\zeta,\varepsilon}^{\text{local}}$ does not converge to \mathfrak{D}_ζ but to $\mathfrak{D}_{Z(\zeta)}$ is surprising. Instead, if we consider a family of Dirac operators $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{non-local}}$ with the non-local potentials $-Z|v_\varepsilon\rangle\langle v_\varepsilon|$, where v_ε still converges to the Dirac delta function δ as $\varepsilon \rightarrow 0^+$, then $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{non-local}}$ converges (in the norm-resolvent sense), as expected, to \mathfrak{D}_Z as $\varepsilon \rightarrow 0^+$ [SM81; CKN87; CKN88;

Šeb89; Hug95; KB98; HT22],

$$\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{non-local}} = \mathfrak{D}_m^0 - Z |v_\varepsilon\rangle \langle v_\varepsilon| \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} \mathfrak{D}_Z. \quad (4.38)$$

In a finite basis $\{\chi_n\}$ of functions that are continuous at $x = 0$, the matrix elements of the local and non-local operators $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{local}}$ and $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{non-local}}$ both reduce, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0^+$, to the matrix elements of the operator \mathfrak{D}_Z as given in (4.37), i.e.

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \langle \chi_n, \mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{local}} \chi_m \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \langle \chi_n, \mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}^{\text{non-local}} \chi_m \rangle \\ &= \langle \chi_n, \mathfrak{D}_m^0 \chi_m \rangle - Z \chi_n^*(0) \chi_m(0) = \langle \chi_n, \mathfrak{D}_Z \chi_m \rangle. \end{aligned}$$

Expressing the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian as a limit of a family of Dirac operators $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon} = \mathfrak{D}_0 + V_\varepsilon$ with the non-local potentials $V_\varepsilon = -Z |v_\varepsilon\rangle \langle v_\varepsilon|$ (see Eq. (4.38)) allows one to confirm the calculation of the Green function in Section 2.2. For this, let us first write the operator $\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}$ in momentum space,

$$\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon}(p, p') = \mathfrak{D}_0(p, p') + V_\varepsilon(p, p'),$$

where $\mathfrak{D}_0(p, p')$ is given in (4.8) and

$$V_\varepsilon(p, p') = -\frac{Z}{2\pi} \mathbf{I}_2 \tilde{v}_\varepsilon(p) \tilde{v}_\varepsilon^*(p'),$$

with $\tilde{v}_\varepsilon(p) = \int_{-\infty}^{\infty} v_\varepsilon(x) e^{-ipx} dx \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 1$. The corresponding Green function operator $G_{Z,\varepsilon}(\omega) = (\omega \mathbf{I}_2 - \mathfrak{D}_{Z,\varepsilon})^{-1}$ satisfies the Dyson equation, for $\omega \in \mathbb{C} \setminus \sigma(\mathfrak{D}_{Z,\varepsilon})$,

$$G_{Z,\varepsilon}(p, p'; \omega) = G_0(p, p'; \omega) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G_0(p, p_1; \omega) V_\varepsilon(p_1, p_2) G_{Z,\varepsilon}(p_2, p'; \omega) dp_1 dp_2,$$

where $G_0(p, p'; \omega)$ is given in (4.9). Using the expression of $V_\varepsilon(p, p')$, the Dyson equation can be simplified as

$$G_{Z,\varepsilon}(p, p'; \omega) = G_0(p, p'; \omega) - \frac{Z}{2\pi} \bar{G}_{0,\varepsilon}^*(p; \omega) \bar{G}_{Z,\varepsilon}(p'; \omega), \quad (4.39)$$

where $\bar{G}_{0,\varepsilon}(p, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{v}_\varepsilon^*(p_1) G_0(p_1, p; \omega) dp_1$ and $\bar{G}_{Z,\varepsilon}(p'; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{v}_\varepsilon^*(p_2) G_{Z,\varepsilon}(p_2, p'; \omega) dp_2$. Multiplying Eq. (4.39) by $\tilde{v}_\varepsilon^*(p)$ and integrating over p gives

$$\bar{G}_{Z,\varepsilon}(p'; \omega) = \bar{G}_{0,\varepsilon}(p'; \omega) - \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega) \bar{G}_{Z,\varepsilon}(p'; \omega),$$

where $\bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{v}_\varepsilon^*(p) G_0(p, p'; \omega) \tilde{v}_\varepsilon(p') dp dp'$, and thus

$$\bar{G}_{Z,\varepsilon}(p'; \omega) = \left[\mathbf{I}_2 + \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega) \right]^{-1} \bar{G}_{0,\varepsilon}(p'; \omega).$$

Inserting the last expression in (4.39), we obtain, for $\Delta G_{Z,\varepsilon}(p, p'; \omega) = G_{Z,\varepsilon}(p, p'; \omega) - G_0(p, p'; \omega)$,

$$\Delta G_{Z,\varepsilon}(p, p'; \omega) = -\frac{Z}{2\pi} \bar{G}_{0,\varepsilon}^*(p; \omega) \left[\mathbf{I}_2 + \frac{Z}{2\pi} \bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega) \right]^{-1} \bar{G}_{0,\varepsilon}(p'; \omega).$$

From Eq. (4.9), we obtain the expressions of $\bar{G}_{0,\varepsilon}$ and $\bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}$,

$$\bar{G}_{0,\varepsilon}(p; \omega) = \frac{\tilde{v}_\varepsilon^*(p)}{\omega^2 - \varepsilon_p^2} \begin{bmatrix} mc^2 + \omega & cp \\ cp & -mc^2 + \omega \end{bmatrix},$$

and

$$\bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{v}_\varepsilon^*(p) \tilde{v}_\varepsilon(p)}{\omega^2 - \varepsilon_p^2} \begin{bmatrix} mc^2 + \omega & cp \\ cp & -mc^2 + \omega \end{bmatrix} dp.$$

Clearly, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, $\bar{G}_{0,\varepsilon}(p; \omega)$ goes to $\bar{G}_0(p; \omega)$ in (4.11). Moreover, since v_ε is a real-valued function, we have $\tilde{v}_\varepsilon^*(p) = \tilde{v}_\varepsilon(-p)$. So, $\tilde{v}_\varepsilon^*(p) \tilde{v}_\varepsilon(p)$ is an even function of p , and the integral defining the off-diagonal elements of $\bar{G}_{0,\varepsilon}$ corresponds to an integral of an odd function of p over $(-\infty, +\infty)$ and is thus zero. This confirms the zero off-diagonal elements of \bar{G}_0 in Eq. (4.12) obtained by means of the Cauchy principal value. We thus conclude that, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, $\bar{\bar{G}}_{0,\varepsilon}(\omega)$ goes to $\bar{\bar{G}}_0(\omega)$ in (4.12). This confirms the calculation of the Green function in Section 2.2.

Appendix C. Rate of convergence of the bound state energy in a plane wave basis

In this appendix, we study the rate of convergence of the bound state energy of the 1D hydrogen-like Dirac atom in a plane wave basis.

The exact bound state eigenfunction of the 1D hydrogen-like Dirac Hamiltonian \mathfrak{D}_Z has the form (see Eq. (4.6))

$$\psi_b^Z(x) = \begin{bmatrix} \psi^L(x) \\ \psi^S(x) \end{bmatrix},$$

with $\psi^L(x) = A_b e^{-\kappa_b |x|}$ and $\psi^S(x) = iA_b \text{sign}(x) (Z/2c) e^{-\kappa_b |x|}$ (the expressions of the constants A_b and κ_b are given after Eq. (4.6)). The associated exact bound state energy is

$$\varepsilon_b^Z = \langle \psi_b^Z, \mathfrak{D}_Z \psi_b^Z \rangle = \langle \psi_b^Z, mc^2 \sigma_3 \psi_b^Z \rangle. \quad (4.40)$$

The last equality in (4.40) comes from the relativistic virial theorem [Bra83; Sha03; FG22], which can be shown, e.g. using a scaling argument, to have the same form for the 1D Dirac equation with a Dirac delta potential as for the 3D Dirac equation with a Coulomb potential. It provides a convenient expression for calculating the energy.

We consider a complete plane wave basis $\{\chi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ on the interval $[-L/2, L/2]$ where $\chi_n(x) = (1/\sqrt{L}) e^{ik_n x}$ and $k_n = 2\pi n/L$, and use it to expand the restriction of the exact bound state eigenfunction ψ_b^Z to the interval $[-L/2, L/2]$. Since ψ^L and ψ^S are even and odd functions, respectively, we introduce even and odd basis functions:

$$\chi_n^g(x) = \begin{cases} \chi_0(x) & \text{for } n = 0 \\ \frac{\chi_n(x) + \chi_{-n}(x)}{\sqrt{2}} & \text{for } n \in \mathbb{N}^* \end{cases} \quad \text{and} \quad \chi_n^u(x) = \frac{\chi_n(x) - \chi_{-n}(x)}{\sqrt{2}} \quad \text{for } n \in \mathbb{N}^*.$$

For $x \in [-L/2, L/2]$, we have thus

$$\psi^L(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^L \chi_n^g(x) \quad \text{and} \quad \psi^S(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^S \chi_n^u(x),$$

with coefficients

$$c_n^L = \langle \psi^L, \chi_n^g \rangle_L = \begin{cases} \frac{2A_b}{\kappa_b \sqrt{L}} \left(1 - e^{-\kappa_b L/2}\right) & \text{for } n = 0 \\ \frac{2\sqrt{2}A_b \kappa_b}{\sqrt{L}} \frac{1 - (-1)^n e^{-\kappa_b L/2}}{\kappa_b + k_n^2} & \text{for } n \in \mathbb{N}^*, \end{cases} \quad (4.41)$$

$$c_n^S = \langle \psi^S, \chi_n^u \rangle_L = -\frac{Z k_n}{2c\kappa_b} c_n^L \quad \text{for } n \in \mathbb{N}^*. \quad (4.42)$$

As $n \rightarrow \infty$, the large component coefficients c_n^L decay as $1/n^2$ while the small component coefficients c_n^S decay as $1/n$.

We now consider the best approximation (in the sense of the L^2 norm) $\tilde{\psi}_b^Z$ to ψ_b^Z in the finite basis $\{\chi_n\}_{|n| \leq n_{\max}}$, for $x \in [-L/2, L/2]$,

$$\tilde{\psi}_b^Z(x) = \begin{bmatrix} \tilde{\psi}^L(x) \\ \tilde{\psi}^S(x) \end{bmatrix},$$

where

$$\tilde{\psi}^L(x) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} c_n^L \chi_n^g(x) \quad \text{and} \quad \tilde{\psi}^S(x) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} c_n^S \chi_n^u(x).$$

The corresponding approximation to the bound state energy, as a function of the the IR cut-off L and the UV cut-off $\Lambda = 2\pi n_{\max}/L$, is

$$\tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \Lambda) = \langle \tilde{\psi}_b^Z, mc^2 \sigma_3 \tilde{\psi}_b^Z \rangle_L = mc^2 \left(\sum_{n=0}^{n_{\max}} |c_n^L|^2 - \sum_{n=1}^{n_{\max}} |c_n^S|^2 \right).$$

From the expression of the coefficients in (4.41) and (4.42), we find the behavior of the bound state energy as $\Lambda \rightarrow \infty$,

$$\tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \Lambda) \underset{\Lambda \rightarrow \infty}{\sim} \tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \infty) + \frac{A_b^2 Z^2 (1 + e^{-\kappa_b L})}{\pi c^2 \Lambda},$$

with

$$\tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \infty) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \Lambda) = (1 - e^{-\kappa_b L}) \varepsilon_b^Z,$$

where ε_b^Z is the exact bound state energy. We thus find that $\tilde{\varepsilon}_b^Z(L, \Lambda)$ converges as $1/\Lambda$ as $\Lambda \rightarrow \infty$. This asymptotic convergence rate comes entirely from the small component contribution which, having a discontinuity at $x = 0$ in addition to a derivative discontinuity, represents the limiting factor in the convergence of the bound state energy. We also see that, at least for Λ large enough, the bound state energy converges exponentially with L as $L \rightarrow \infty$. Even though the best approximated eigenfunction $\tilde{\psi}_b^Z$ in the the sense of the L^2 norm considered here does not exactly correspond to the approximated eigenfunction obtained in Section 3.1 by diagonalising the Hamiltonian in the plane wave basis, in practice we expect a similar convergence rate for the latter case.

Bibliography

- [AD00] V. Alonso and S. De Vincenzo. « Delta-Type Dirac Point Interactions and Their Nonrelativistic Limits ». In: *International Journal of Theoretical Physics* 39.6 (2000), pp. 1483–1498.
- [And32] C. D. Anderson. « The Apparent Existence of Easily Deflectable Positives ». In: *Science* 76.1967 (1932), pp. 238–239.
- [And36] C. Anderson. « The production and properties of positrons ». In: *Nobel Lecture* (1936).
- [AS64] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*. United States Department of Commerce, National Bureau of Standards, 1964.
- [AT23] T. Audinet and J. Toulouse. « Effective quantum electrodynamics: One-dimensional model of the relativistic hydrogen-like atom ». In: *The Journal of Chemical Physics* 158.24 (2023).
- [Aut12] J. Autschbach. « Perspective: Relativistic effects ». In: *The Journal of Chemical Physics* 136.15 (2012).
- [Bac+99] V. Bach, J.-M. Barbaroux, B. Helffer, and H. Siedentop. « On the stability of the relativistic electron-positron field ». In: *Communications in Mathematical Physics* 201.2 (1999), pp. 445–460.
- [BD64] J. Bjorken and S. Drell. *Relativistic quantum mechanics*. McGraw-Hill, New York, 1964.
- [BD65] J. Bjorken and S. Drell. *Relativistic quantum fields*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [BD94] S. Benvegnù and L. Dabrowski. « Relativistic point interaction ». In: *Letters in Mathematical Physics* 30.2 (1994), pp. 159–167.
- [Bel61] R. Bellman. *A brief introduction to theta functions*. Dover Publications, 1961.
- [Ber74] C. W. Bernard. « Feynman rules for gauge theories at finite temperature ». In: *Physical Review D* 9.12 (1974), pp. 3312–3320.
- [BH01] M. G. Baring and A. K. Harding. « Photon splitting and pair creation in highly magnetized pulsars ». In: *The Astrophysical Journal* 547.2 (2001), pp. 929–948.
- [Bra83] M. Brack. « Virial theorems for relativistic spin- $\frac{1}{2}$ and spin-0 particles ». In: *Physical Review D* 27.8 (1983), pp. 1950–1953.
- [Bur+97] D. L. Burke et al. « Positron production in multiphoton light-by-light scattering ». In: *Physical Review Letters* 79.9 (1997), pp. 1626–1629.
- [Cha+55] O. Chamberlain, E. Segrè, C. Wiegand, and T. Ypsilantis. « Observation of Antiprotons ». In: *Physical Review* 100.3 (1955), pp. 947–950.

- [Cha91] P. Chaix. « Le vide de l'électrodynamique à température finie, à l'approximation du champs moyen ». In: *Note CEA-N-2680* (1991).
- [CI89] P. Chaix and D. Iracane. « From quantum electrodynamics to mean-field theory. I. The Bogoliubov-Dirac-Fock formalism ». In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 22.23 (1989), pp. 3791–3814.
- [CIL89] P. Chaix, D. Iracane, and P. Lions. « From quantum electrodynamics to mean-field theory. II. Variational stability of the vacuum of quantum electrodynamics in the mean-field approximation ». In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 22.23 (1989), pp. 3815–3828.
- [CKN87] M. G. Calkin, D. Kiang, and Y. Nogami. « Proper treatment of the delta function potential in the one-dimensional Dirac equation ». In: *American Journal of Physics* 55.8 (1987), pp. 737–739.
- [CKN88] M. G. Calkin, D. Kiang, and Y. Nogami. « Nonlocal separable potential in the one-dimensional Dirac equation ». In: *Physical Review C* 38.2 (1988), pp. 1076–1077.
- [CL99] E. Cancès and C. Le Bris. « On the time-dependent Hartree-Fock equations coupled with a classical nuclear dynamics ». In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 9.7 (1999), pp. 963–990.
- [CLM06] E. Cancès, C. Le Bris, and Y. Maday. *Méthodes mathématiques en chimie quantique. Une introduction*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [CN87] F. A. B. Coutinho and Y. Nogami. « Exactly solvable relativistic Hartree-Fock equation ». In: *Physical Review A* 36.3 (1987), pp. 1008–1012.
- [Col92] J. F. Colombeau. *Multiplication of Distributions. A tool in mathematics, numerical engineering and theoretical physics*. Springer Berlin Heidelberg, 1992.
- [Con72] D. Constantinescu. « Vacuum polarization in magnetic field ». In: *Nuclear Physics B* 36.1 (1972), pp. 121–129.
- [Cor+56] B. Cork, G. R. Lambertson, O. Piccioni, and W. A. Wenzel. « Antineutrons Produced from Antiprotons in Charge-Exchange Collisions ». In: *Physical Review* 104.4 (1956), pp. 1193–1197.
- [CSN19] F. Cacciafesta, A.-S. de Suzzoni, and D. Noja. « A Dirac field interacting with point nuclear dynamics ». In: *Mathematische Annalen* 376.3–4 (2019), pp. 1261–1301.
- [Das11] A. Das. « Finite temperature effective actions ». In: *Journal of Physics: Conference Series* 287 (2011).
- [DF07] K. G. Dyall and K. Faegri. *Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*. Oxford University Press, 2007.
- [DF09] A. Das and J. Frenkel. « Effective actions at finite temperature ». In: *Physical Review D* 80.12 (2009), p. 125039.
- [DF10] A. Das and J. Frenkel. « Thermal effective action for 1+1 dimensional massive QED ». In: *Physical Review D* 82.12 (2010), p. 125002.
- [DF11] A. Das and J. Frenkel. « The thermal chiral anomaly in the Schwinger model ». In: *Physics Letters B* 704.1–2 (2011), pp. 85–88.
- [DG00] W. Dittrich and H. Gies. *Probing the quantum vacuum. Perturbative effective action approach in quantum electrodynamics and its application*. Springer Berlin, Heidelberg, 2000. 241 pp.

- [Dir28] P. A. M. Dirac. « The quantum theory of the electron ». In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 117.778 (1928), pp. 610–624.
- [Dir30] P. A. M. Dirac. « A theory of electrons and protons ». In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 126.801 (1930), pp. 360–365.
- [Dir33] P. A. M. Dirac. « Theory of electrons and positrons ». In: *Nobel Lecture* (1933).
- [Dir34a] P. A. M. Dirac. « Discussion of the infinite distribution of electrons in the theory of the positron ». In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 30.2 (1934), pp. 150–163.
- [Dir34b] P. A. M. Dirac. « Théorie du positron ». In: *Solvay report, Gauthier-Villars XXV, 353S* (1934), pp. 203–212.
- [Dir58] P. A. M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. International series of monographs on physics 27. Clarendon Press, Oxford University Press, 1958. 314 pp.
- [Dit79] W. Dittrich. « Effective Lagrangians at finite temperature ». In: *Physical Review D* 19.8 (1979), pp. 2385–2390.
- [DJ74] L. Dolan and R. Jackiw. « Symmetry behavior at finite temperature ». In: *Physical Review D* 9.12 (1974), pp. 3320–3341.
- [DPV12] E. Di Nezza, G. Palatucci, and E. Valdinoci. « Hitchhikers guide to the fractional Sobolev spaces ». In: *Bulletin des Sciences Mathématiques* 136.5 (2012), pp. 521–573.
- [DS03] V. I. Denisov and S. I. Svertilov. « Vacuum nonlinear electrodynamics curvature of photon trajectories in pulsars and magnetars ». In: *Astronomy & Astrophysics* 399.3 (2003), pp. L39–L42.
- [Dys49] F. J. Dyson. « The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman ». In: *Physical Review* 75.3 (1949), pp. 486–502.
- [ED87] E. Engel and R. M. Dreizler. « Field-theoretical approach to a relativistic Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker model ». In: *Physical Review A* 35.9 (1987), pp. 3607–3618.
- [EK35] H. Euler and B. Kockel. « Über die Streuung von Licht an Licht nach der Diracschen Theorie ». In: *Die Naturwissenschaften* 23.15 (1935), pp. 246–247.
- [ELS08] M. J. Esteban, M. Lewin, and É. Séré. « Variational methods in relativistic quantum mechanics ». In: *Bulletin of the American Mathematical Society* 45.4 (2008), pp. 535–593.
- [EPS93] P. Elmfors, D. Persson, and B.-S. Skagerstam. « QED effective action at finite temperature and density ». In: *Physical Review Letters* 71.4 (1993), pp. 480–483.
- [ES01] M. Esteban and E. Séré. « Nonrelativistic Limit of the Dirac-Fock Equations ». In: *Annales Henri Poincaré* 2.5 (2001), pp. 941–961.
- [ES95] P. Elmfors and B.-S. Skagerstam. « Electromagnetic fields in a thermal background ». In: *Physics Letters B* 348.1-2 (1995), pp. 141–148.
- [ES99] M. J. Esteban and E. Séré. « Solutions of the Dirac-Fock equations for atoms and molecules ». In: *Communications in Mathematical Physics* 203.3 (1999), pp. 499–530.

- [Fan+17] X. Fan et al. « The OVAL experiment: a new experiment to measure vacuum magnetic birefringence using high repetition pulsed magnets ». In: *The European Physical Journal D* 71.11 (2017).
- [FE54] L. L. Foldy and E. Eriksen. « Some Physical Consequences of Vacuum Polarization ». In: *Physical Review* 95.4 (1954), pp. 1048–1051.
- [FG22] C. F. Fischer and M. Godefroid. « Variational Methods for Atoms and the Virial Theorem ». In: *Atoms* 10.4 (2022), p. 110.
- [FG87] P. Falkensteiner and H. Grosse. « Quantization of fermions interacting with point-like external fields ». In: *Letters in Mathematical Physics* 14.2 (1987), pp. 139–148.
- [FGQ24a] D. J. Flynn, I. P. Grant, and H. M. Quiney. *Vacuum polarization in molecules I: Uehling interaction*. 2024.
- [FGQ24b] D. J. Flynn, I. P. Grant, and H. M. Quiney. *Vacuum polarization in molecules II: higher order corrections*. 2024.
- [FLB12] F. Fillion-Gourdeau, E. Lorin, and A. D. Bandrauk. « Relativistic Stark resonances in a simple exactly soluble model for a diatomic molecule ». In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 45.21 (2012), p. 215304.
- [Foc30] V. Fock. « Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems ». In: *Zeitschrift für Physik* 61.1–2 (1930), pp. 126–148.
- [Fro56] A. A. Frost. « Delta-Function Model. I. Electronic Energies of Hydrogen-Like Atoms and Diatomic Molecules ». In: *The Journal of Chemical Physics* 25.6 (1956), pp. 1150–1154.
- [Fur37] W. H. Furry. « A Symmetry Theorem in the Positron Theory ». In: *Physical Review* 51.2 (1937), pp. 125–129.
- [FW71] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. International series in pure and applied physics. New York, NY: McGraw-Hill, 1971. 601 pp.
- [GKS23] D. Gontier, A. E. K. Kouande, and É. Séré. « Phase transition in the Peierls model for polyacetylene ». In: *Annales Henri Poincaré* 24 (2023), pp. 3945–3966.
- [GLS09] P. Gravejat, M. Lewin, and É. Séré. « Ground state and charge renormalization in a nonlinear model of relativistic atoms ». In: *Communications in Mathematical Physics* 286.1 (2009), pp. 179–215.
- [GLS11] P. Gravejat, M. Lewin, and É. Séré. « Renormalization and asymptotic expansion of Dirac’s polarized vacuum ». In: *Communications in Mathematical Physics* 306.1 (2011), pp. 1–33.
- [GLS18] P. Gravejat, M. Lewin, and É. Séré. « Derivation of the magnetic Euler–Heisenberg energy ». In: *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 117 (2018), pp. 59–93.
- [GO87] H. Grosse and G. Opelt. « Fractional charges in external field problems and the inverse scattering method ». In: *Nuclear Physics B* 285 (1987), pp. 143–161.
- [GQ22] I. Grant and H. Quiney. « GRASP: The Future? » In: *Atoms* 10.4 (2022), p. 108.

- [GR09] W. Greiner and J. Reinhardt. *Quantum electrodynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [GR65] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, New York, 1965.
- [GR96] W. Greiner and J. Reinhardt. *Field Quantization*. Springer Berlin Heidelberg, 1996.
- [Gra+12] P. Gravejat, C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. « Two Hartree-Fock models for the vacuum polarization ». In: *Journées équations aux dérivées partielles* (2012), pp. 1–31.
- [Gra+13] P. Gravejat, C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. « Construction of the Pauli-Villars-regulated Dirac vacuum in electromagnetic fields ». In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 208.2 (2013), pp. 603–665.
- [Gro+01] M. Grosser, M. Kunzinger, M. Oberguggenberger, and R. Steinbauer. *Geometric Theory of Generalized Functions with Applications to General Relativity*. Springer Netherlands, 2001.
- [GRS60] R. Glauber, W. Rarita, and P. Schwed. « Vacuum Polarization Effects on Energy Levels in μ -Mesonic Atoms ». In: *Physical Review* 120.2 (1960), pp. 609–613.
- [Gsp08] A. Gsponer. « A concise introduction to Colombeau generalized functions and their applications in classical electrodynamics ». In: *European Journal of Physics* 30.1 (2008), pp. 109–126.
- [Gui+19] J. M. Guilarte, J. M. Munoz-Castaneda, I. Pirozhenko, and L. Santamaría-Sanz. « One-Dimensional Scattering of Fermions on δ -Impurities ». In: *Frontiers in Physics* 7 (2019).
- [GW81] J. Goldstone and F. Wilczek. « Fractional Quantum Numbers on Solitons ». In: *Physical Review Letters* 47.14 (1981), pp. 986–989.
- [Hai+07] C. Hainzl, M. Lewin, É. Séré, and J. P. Solovej. « Minimization method for relativistic electrons in a mean-field approximation of quantum electrodynamics ». In: *Physical Review A* 76.5 (2007), pp. 52–104.
- [Hai04] C. Hainzl. « On the Vacuum Polarization Density Caused by an External Field ». In: *Annales Henri Poincaré* 5.6 (2004), pp. 1137–1157.
- [Har28] D. R. Hartree. « The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods ». In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 24.1 (1928), pp. 89–110.
- [HE36] W. Heisenberg and H. Euler. « Folgerungen aus der Diracschen Theorie des Positrons ». In: *Zeitschrift für Physik* 98.11–12 (1936), pp. 714–732.
- [Hei34] W. Heisenberg. « Bemerkungen zur Diracschen Theorie des Positrons ». In: *Zeitschrift für Physik* 90.3-4 (1934), pp. 209–231.
- [Her86] D. R. Herschbach. « Dimensional interpolation for two-electron atoms ». In: *The Journal of Chemical Physics* 84.2 (1986), pp. 838–851.
- [HFG11] D. Hanneke, S. Fogwell Hoogerheide, and G. Gabrielse. « Cavity control of a single-electron quantum cyclotron: Measuring the electron magnetic moment ». In: *Physical Review A* 83.5 (2011), p. 052122.

- [HLS05a] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. « Existence of a stable polarized vacuum in the Bogoliubov-Dirac-Fock approximation ». In: *Communications in Mathematical Physics* 257.3 (2005), pp. 515–562.
- [HLS05b] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. « Self-consistent solution for the polarized vacuum in a no-photon QED model ». In: *Journal of Physics A* 38.20 (2005), pp. 4483–4499.
- [HLS05c] C. Hainzl, M. Lewin, and C. Sparber. « Existence of global-in-time solutions to a generalized Dirac-Fock type evolution equation ». In: *Letters in Mathematical Physics* 72.2 (2005), pp. 99–113.
- [HLS07] C. Hainzl, M. Lewin, and J. P. Solovej. « The mean-field approximation in quantum electrodynamics: The no-photon case ». In: *Communications on Pure and Applied Mathematics* 60.4 (2007), pp. 546–596.
- [HLS08] C. Hainzl, M. Lewin, and R. Seiringer. « A nonlinear model for relativistic electrons at positive temperature ». In: *Reviews in Mathematical Physics* 20.10 (2008), pp. 1283–1307.
- [HLS09] C. Hainzl, M. Lewin, and É. Séré. « Existence of atoms and molecules in the mean-field approximation of no-photon quantum electrodynamics ». In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 192.3 (2009), pp. 453–499.
- [HS00] W. Hunziker and I. M. Sigal. « The quantum N-body problem ». In: *Journal of Mathematical Physics* 41.6 (2000), pp. 3448–3510.
- [HS03] C. Hainzl and H. Siedentop. « Non-Perturbative Mass and Charge Renormalization in Relativistic No-Photon Quantum Electrodynamics ». In: *Communications in Mathematical Physics* 243.2 (2003), pp. 241–260.
- [HS75] D. R. Herrick and F. H. Stillinger. « Variable dimensionality in atoms and its effect on the ground state of the helium isoelectronic sequence ». In: *Physical Review A* 11.1 (1975), pp. 42–53.
- [HT22] L. Heriban and M. Tušek. « Non-self-adjoint relativistic point interaction in one dimension ». In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 516.2 (2022), p. 126536.
- [Hug95] R. J. Hughes. « Renormalization of the relativistic delta potential in one dimension ». In: *Letters in Mathematical Physics* 34.4 (1995), pp. 395–406.
- [Hug97] R. J. Hughes. « Relativistic point interactions: Approximation by smooth potentials ». In: *Reports on Mathematical Physics* 39.3 (1997), pp. 425–432.
- [Hug99] R. J. Hughes. « Finite-Rank Perturbations of the Dirac Operator ». In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 238.1 (1999), pp. 67–81.
- [IGS01] M. I. Eides, H. Grotch, and V. A. Shelyuto. « Theory of light hydrogenlike atoms ». In: *Physics Reports* 342.2–3 (2001), pp. 63–261.
- [IM17] P. Indelicato and J. Mohr. « Introduction to bound-state quantum electrodynamics ». In: *Handbook of Relativistic Quantum Chemistry*. Springer Berlin Heidelberg, 2017, pp. 131–241.
- [JR76] R. Jackiw and C. Rebbi. « Solitons with fermion number $\frac{1}{2}$ ». In: *Physical Review D* 13.12 (1976), pp. 3398–3409.
- [KB98] P. Kurasov and J. Boman. « Finite rank singular perturbations and distributions with discontinuous test functions ». In: *Proceedings of the American Mathematical Society* 126.6 (1998), pp. 1673–1683.

- [KL72] D. Kirzhnits and A. Linde. « Macroscopic consequences of the Weinberg model ». In: *Physics Letters B* 42.4 (1972), pp. 471–474.
- [KR87] I. V. Krive and A. S. Rozhavskii. « Fractional charge in quantum field theory and solid-state physics ». In: *Soviet Physics Uspekhi* 30.5 (1987), pp. 370–392.
- [KS82] S. Kivelson and J. R. Schrieffer. « Fractional charge, a sharp quantum observable ». In: *Physical Review B* 25.10 (1982), pp. 6447–6451.
- [Kut12] W. Kutzelnigg. « Solved and unsolved problems in relativistic quantum chemistry ». In: *Chemical Physics* 395 (2012), pp. 16–34.
- [Kut84] W. Kutzelnigg. « Basis set expansion of the Dirac operator without variational collapse ». In: *International Journal of Quantum Chemistry* 25.1 (1984), pp. 107–129.
- [LAH56] L. D. Landau, A. Abrikosov, and L. Halatnikov. « On the quantum theory of fields ». In: *Il Nuovo Cimento* 3.S1 (1956), pp. 80–104.
- [Lap83] I. R. Lapidus. « Relativistic one-dimensional hydrogen atom ». In: *American Journal of Physics* 51.11 (1983), pp. 1036–1038.
- [Lei75] G. Leibbrandt. « Introduction to the technique of dimensional regularization ». In: *Reviews of Modern Physics* 47.4 (1975), pp. 849–876.
- [Lew11a] M. Lewin. « Renormalization of Dirac’s polarized vacuum ». In: *Mathematical Results in Quantum Physics: Proceedings of the Qmath11 Conference*. Ed. by P. Exner. World Scientific Publishing, 2011, pp. 45–59.
- [Lew11b] M. Lewin. « Geometric methods for nonlinear many-body quantum systems ». In: *Journal of Functional Analysis* 260.12 (2011), pp. 3535–3595.
- [Lew12] M. Lewin. « A nonlinear variational problem in relativistic quantum mechanics ». In: *European Congress of Mathematics Kraków, 2 – 7 July, 2012*. European Mathematical Society Publishing House, 2012, pp. 627–641.
- [Lie81] E. H. Lieb. « Variational Principle for Many-Fermion Systems ». In: *Physical Review Letters* 46.7 (1981), pp. 457–459.
- [Lio87] P. L. Lions. « Solutions of Hartree-Fock equations for Coulomb systems ». In: *Communications in Mathematical Physics* 109.1 (1987), pp. 33–97.
- [Liu14a] W. Liu. « Advances in relativistic molecular quantum mechanics ». In: *Physics Reports* 537.2 (2014), pp. 59–89.
- [Liu14b] W. Liu. « Effective quantum electrodynamics Hamiltonians: A tutorial review ». In: *International Journal of Quantum Chemistry* 115.10 (2014), pp. 631–640.
- [Liu20] W. Liu. « Essentials of relativistic quantum chemistry ». In: *The Journal of Chemical Physics* 152.18 (2020).
- [Liu22] W. Liu. « Perspective: Simultaneous treatment of relativity, correlation, and QED ». In: *WIREs Computational Molecular Science* 13.4 (2022).
- [LL05] C. Le Bris and P.-L. Lions. « From atoms to crystals: a mathematical journey ». In: *Bulletin of the American Mathematical Society* 42.03 (2005), pp. 291–364.
- [LL13] W. Liu and I. Lindgren. « Going beyond “no-pair relativistic quantum chemistry” ». In: *The Journal of Chemical Physics* 139.1 (2013).

- [LLS22] M. Lewin, E. H. Lieb, and R. Seiringer. « Universal Functionals in Density Functional Theory ». In: *Density Functional Theory. Mathematics and Molecular Modeling*. Springer International Publishing, 2022, pp. 115–182.
- [LLY19] L. Lin, J. Lu, and L. Ying. « Numerical methods for Kohn–Sham density functional theory ». In: *Acta Numerica* 28 (2019), pp. 405–539.
- [LR47] W. E. Lamb and R. C. Retherford. « Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method ». In: *Physical Review* 72.3 (1947), pp. 241–243.
- [LS09] M. Lewin and É. Séré. « Spectral pollution and how to avoid it ». In: *Proceedings of the London Mathematical Society* 100.3 (2009), pp. 864–900.
- [LS14] M. Lewin and É. Séré. « Spurious Modes in Dirac Calculations and How to Avoid Them ». In: *Many-Electron Approaches in Physics, Chemistry and Mathematics. Mathematical Physics Studies*. Ed. by V. Bach and L. Delle Site. Springer International Publishing, 2014, pp. 31–52.
- [LS77] E. H. Lieb and B. Simon. « The Hartree-Fock theory for Coulomb systems ». In: *Communications in Mathematical Physics* 53.3 (1977), pp. 185–194.
- [LS90] M. Loewe and M. Sanhueza. « Supercritical effects and the δ potential ». In: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 23.4 (1990), pp. 553–561.
- [LSÅ04] I. Lindgren, S. Salomonson, and B. Åsén. « The covariant-evolution-operator method in bound-state QED ». In: *Physics Reports* 389.4 (2004), pp. 161–261.
- [Mal+22] A. V. Malyshev, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, and V. A. Zaytsev. « Model-QED operator for superheavy elements ». In: *Physical Review A* 106.1 (2022), p. 012806.
- [MBS03] M. Marklund, G. Brodin, and L. Stenflo. « Electromagnetic wave collapse in a radiation background ». In: *Physical Review Letters* 91.16 (2003), p. 163601.
- [Mig+16] R. P. Mignani et al. « Evidence for vacuum birefringence from the first optical-polarimetry measurement of the isolated neutron star RX J1856.5-3754 ». In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 465.1 (2016), pp. 492–500.
- [Mor23] U. Morellini. « Relativistic electrons coupled with Newtonian nuclear dynamics ». In: (2023). arXiv: [2310.13501](https://arxiv.org/abs/2310.13501) [math.AP].
- [Mor24] U. Morellini. « The free energy of Dirac’s vacuum in purely magnetic fields ». In: (2024). arXiv: [2404.12733](https://arxiv.org/abs/2404.12733) [math-ph].
- [MPS98] P. J. Mohr, G. Plunien, and G. Soff. « QED corrections in heavy atoms ». In: *Physics Reports* 293.5-6 (1998), pp. 227–369.
- [MS76] D. B. Melrose and R. J. Stoneham. « Vacuum polarization and photon propagation in a magnetic field ». In: *Il Nuovo Cimento A* 32.4 (1976), pp. 435–447.
- [MS87a] B. H. J. McKellar and G. J. Stephenson. « Klein paradox and the Dirac-Kronig-Penney model ». In: *Physical Review A* 36.6 (1987), pp. 2566–2569.
- [MS87b] B. H. J. McKellar and G. J. Stephenson. « Relativistic quarks in one-dimensional periodic structures ». In: *Physical Review C* 35.6 (1987), pp. 2262–2271.
- [MTB06] G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov. « Optics in the relativistic regime ». In: *Reviews of Modern Physics* 78.2 (2006), pp. 309–371.

- [NB86] Y. Nogami and D. J. Beachey. « Vacuum Polarization and Fractional Fermion Number: An Elementary Example ». In: *Europhysics Letters* 2.9 (1986), pp. 661–665.
- [Nen80] G. Nenciu. « On the adiabatic limit for Dirac particles in external fields ». In: *Communications in Mathematical Physics* 76.2 (1980), pp. 117–128.
- [Nen87] G. Nenciu. « Existence of the spontaneous pair creation in the external field approximation of Q.E.D. ». In: *Communications in Mathematical Physics* 109.2 (1987), pp. 303–312.
- [NMM24] A. Nonn, A. Margócsy, and E. Mátyus. « Bound-State Relativistic Quantum Electrodynamics: A Perspective for Precision Physics with Atoms and Molecules ». In: *Journal of Chemical Theory and Computation* 20.11 (2024), pp. 4385–4395.
- [NO83] A. Nikiforov and V. Ouvarov. *Fonctions spéciales de la physique mathématique*. Editions MIR Moscou, 1983.
- [Nog08] Y. Nogami. *Vacuum charge fractionalization re-examined*. 2008.
- [NPT90] Y. Nogami, N. P. Parent, and F. M. Toyama. « Comment on “Supercritical effects and the δ potential” ». In: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 23.23 (1990), pp. 5667–5671.
- [NS86] A. Niemi and G. Semenoff. « Fermion number fractionization in quantum field theory ». In: *Physics Reports* 135.3 (1986), pp. 99–193.
- [Paš+17] L. F. Pašteka, E. Eliav, A. Borschevsky, U. Kaldor, and P. Schwerdtfeger. « Relativistic Coupled Cluster Calculations with Variational Quantum Electrodynamics Resolve the Discrepancy between Experiment and Theory Concerning the Electron Affinity and Ionization Potential of Gold ». In: *Physical Review Letters* 118.2 (2017), p. 023002.
- [Pat00] E. Paturel. « Solutions of the Dirac-Fock equations without projector ». In: *Annales Henri Poincaré* 1.6 (2000), pp. 1123–1157.
- [Pau41] W. Pauli. « Relativistic Field Theories of Elementary Particles ». In: *Reviews of Modern Physics* 13.3 (1941), pp. 203–232.
- [PR14] K. Pankrashkin and S. Richard. « One-dimensional Dirac operators with zero-range interactions: Spectral, scattering, and topological results ». In: *Journal of Mathematical Physics* 55.6 (2014).
- [PV49] W. Pauli and F. Villars. « On the Invariant Regularization in Relativistic Quantum Theory ». In: *Reviews of Modern Physics* 21.3 (1949), pp. 434–444.
- [Pyy11] P. Pyykkö. « The Physics behind Chemistry and the Periodic Table ». In: *Chemical Reviews* 112.1 (2011), pp. 371–384.
- [Pyy12] P. Pyykkö. « Relativistic Effects in Chemistry: More Common Than You Thought ». In: *Annual Review of Physical Chemistry* 63.1 (2012), pp. 45–64.
- [Pyy88] P. Pyykkö. « Relativistic effects in structural chemistry ». In: *Chemical Reviews* 88.3 (1988), pp. 563–594.
- [PZ03] P. Pyykkö and L.-B. Zhao. « Search for effective local model potentials for simulation of quantum electrodynamic effects in relativistic calculations ». In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 36.8 (2003), pp. 1469–1478.

- [RB82] R. Rajaraman and J. Bell. « On solitons with half integral charge ». In: *Physics Letters B* 116.2–3 (1982), pp. 151–154.
- [RG77] J. Reinhardt and W. Greiner. « Quantum electrodynamics of strong fields ». In: *Reports on Progress in Physics* 40.3 (1977), pp. 219–295.
- [RGA71] P.-G. Reinhard, W. Greiner, and H. Arenhövel. « Electrons in strong external fields ». In: *Nuclear Physics A* 166.2 (1971), pp. 173–197.
- [RGV22] M. Rodríguez-Mayorga, K. Giesbertz, and L. Visscher. « Relativistic reduced density matrix functional theory ». In: *SciPost Chemistry* 1.2 (2022).
- [RMG81] J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner. « Theory of positron production in heavy-ion collisions ». In: *Physical Review A* 24.1 (1981), pp. 103–128.
- [RS72] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. I. Functional analysis*. Academic Press, New York, 1972.
- [RS78] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*. Academic Press, New York, 1978.
- [RSP08] K. Rao, N. Sahu, and P. K. Panigrahi. « Fermion number fractionization ». In: *Resonance* 13.8 (2008), pp. 738–751.
- [RW09] M. Reiher and A. Wolf. *Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science*. Wiley, Jan. 2009.
- [Sab12] J. Sabin. « Static Electron–Positron Pair Creation in Strong Fields for a Non-linear Dirac Model ». In: *Annales Henri Poincaré* 14.5 (2012), pp. 1349–1382.
- [Sab14] J. Sabin. « Global well-posedness for a nonlinear wave equation coupled to the Dirac sea ». In: *Applied Mathematics Research eXpress* 2 (2014), pp. 312–331.
- [Sak99] J. J. Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1999. 336 pp.
- [Sal22] M. Salman. « Corrections électrodynamiques quantiques en chimie quantique ». PhD thesis. Ecole Doctorale Sciences de la Matière (Toulouse), 2022.
- [SB72] R. Subramanian and K. V. Bhagwat. « The relativistic Tamm model ». In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 5.8 (1972), pp. 798–806.
- [Sch+15] P. Schwerdtfeger, L. F. Pašteka, A. Punnett, and P. O. Bowman. « Relativistic and quantum electrodynamic effects in superheavy elements ». In: *Nuclear Physics A* 944 (2015), pp. 551–577.
- [Sch02] P. Schwerdtfeger, ed. *Relativistic electronic structure theory. Theoretical and computational chemistry*. Amsterdam: Elsevier Science, 2002.
- [Sch13] M. D. Schwartz. *Quantum field theory and the standard model*. Cambridge University Press, 2013.
- [Sch48] J. Schwinger. « Quantum electrodynamics. I. A covariant formulation ». In: *Physical Review* 74.10 (1948), pp. 1439–1461.
- [Sch51] J. Schwinger. « On gauge invariance and vacuum polarization ». In: *Physical Review* 82.5 (1951), pp. 664–679.
- [Šeb89] P. Šeba. « Klein’s paradox and the relativistic point interaction ». In: *Letters in Mathematical Physics* 18.1 (1989), pp. 77–86.
- [Ser35] R. Serber. « Linear modifications in the Maxwell field equations ». In: *Physical Review* 48.1 (1935), pp. 49–54.

- [Ser36] R. Serber. « A Note on Positron Theory and Proper Energies ». In: *Physical Review* 49.7 (1936), pp. 545–550.
- [SH84] R. E. Stanton and S. Havriliak. « Kinetic balance: A partial solution to the problem of variational safety in Dirac calculations ». In: *The Journal of Chemical Physics* 81.4 (1984), pp. 1910–1918.
- [Sha+04] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff. « Dual Kinetic Balance Approach to Basis-Set Expansions for the Dirac Equation ». In: *Physical Review Letters* 93.13 (Sept. 2004), p. 130405.
- [Sha02] V. Shabaev. « Two-time Green’s function method in quantum electrodynamics of high-Z few-electron atoms ». In: *Physics Reports* 356.3 (2002), pp. 119–228.
- [Sha03] V. M. Shabaev. « Virial Relations for the Dirac Equation and Their Applications to Calculations of Hydrogen-Like Atoms ». In: *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2003, pp. 97–113.
- [Skr21] L. V. Skripnikov. « Approaching meV level for transition energies in the radium monofluoride molecule RaF and radium cation Ra+ by including quantum-electrodynamics effects ». In: *The Journal of Chemical Physics* 154.20 (May 2021).
- [SLK11] Q. Sun, W. Liu, and W. Kutzelnigg. « Comparison of restricted, unrestricted, inverse, and dual kinetic balances for four-component relativistic calculations ». In: *Theoretical Chemistry Accounts* 129.3–5 (2011), pp. 423–436.
- [SM81] B. Sutherland and D. C. Mattis. « Ambiguities with the relativistic δ -function potential ». In: *Physical Review A* 24.3 (1981), pp. 1194–1197.
- [SS20] M. Salman and T. Saue. « Charge Conjugation Symmetry in the Finite Basis Approximation of the Dirac Equation ». In: *Symmetry* 12.7 (2020), p. 1121.
- [SS23] M. Salman and T. Saue. « Calculating the many-potential vacuum polarization density of the Dirac equation in the finite-basis approximation ». In: *Physical Review A* 108.1 (2023), p. 012808.
- [SS65] D. Shale and W. F. Stinespring. « Spinor Representations of Infinite Orthogonal Groups ». In: *Journal of Mathematics and Mechanics* 14.2 (1965), pp. 315–322.
- [SSS22] A. Sunaga, M. Salman, and T. Saue. « 4-component relativistic Hamiltonian with effective QED potentials for molecular calculations ». In: *The Journal of Chemical Physics* 157.16 (2022).
- [STY13] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin. « Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms ». In: *Physical Review A* 88.1 (2013), p. 012513.
- [SV03] T. Saue and L. Visscher. « Four-component electronic structure methods for atoms ». In: *Theoretical chemistry and physics of heavy and superheavy elements*. Ed. by S. Wilson and U. Kaldor. Springer-Science+Business Media, 2003, pp. 211–267.
- [Swi35] B. Swirles. « The relativistic self-consistent field ». In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences* 152.877 (1935), pp. 625–649.
- [TE74] W.-Y. Tsai and T. Erber. « Photon pair creation in intense magnetic fields ». In: *Physical Review D* 10.2 (1974), pp. 492–499.

- [TE75] W.-Y. Tsai and T. Erber. « Propagation of photons in homogeneous magnetic fields: Index of refraction ». In: *Physical Review D* 12.4 (1975), pp. 1132–1137.
- [TGT22] D. Traore, E. Giner, and J. Toulouse. « Basis-set correction based on density-functional theory: Rigorous framework for a one-dimensional model ». In: *The Journal of Chemical Physics* 156.4 (2022).
- [Tha92] B. Thaller. *The Dirac equation*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1992, pp. xviii+357.
- [Tou21] J. Toulouse. « Relativistic density-functional theory based on effective quantum electrodynamics ». In: *SciPost Chemistry* 1.1 (2021).
- [Tuš20] M. Tušek. « Approximation of one-dimensional relativistic point interactions by regular potentials revised ». In: *Letters in Mathematical Physics* 110.10 (2020), pp. 2585–2601.
- [Ueh35] E. A. Uehling. « Polarization Effects in the Positron Theory ». In: *Physical Review* 48.1 (July 1935), pp. 55–63.
- [VD97] L. Visscher and K. Dyall. « Dirac–Fock atomic electronic structure calculations using different nuclear charge distributions ». In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 67.2 (1997), pp. 207–224.
- [Wei36] V. Weisskopf. « Über die Elektrodynamik des Vakuums auf Grund der Quantentheorie des Elektrons ». In: *Mathematisk-fysiske Meddelelser* 16.6 (1936), pp. 1–39.
- [Wei74] S. Weinberg. « Gauge and global symmetries at high temperature ». In: *Physical Review D* 9.12 (1974), pp. 3357–3378.
- [WK56] E. H. Wichmann and N. M. Kroll. « Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field ». In: *Physical Review* 101.2 (1956), pp. 843–859.

Quelques modèles non linéaires autour du vide de Dirac

Résumé

Cette thèse de doctorat est principalement consacrée à l'étude mathématique du vide de Dirac, potentiellement en présence d'un champ électromagnétique et d'électrons. Ce système est décrit à l'aide de modèles non linéaires issus d'approximations de champ moyen de l'électrodynamique quantique. Dans le Chapitre 2, on étudie la dynamique d'un nombre fini d'électrons relativistes interagissant avec un nombre fini de noyaux classiques dans la mer de Dirac, en prouvant que le problème de Cauchy correspondant est globalement bien posé. Dans le Chapitre 3, on fournit la première dérivation rigoureuse du lagrangien magnétique effectif à une boucle à température positive, une fonctionnelle non linéaire décrivant l'énergie libre du vide de Dirac dans un champ magnétique classique. Finalement, dans le Chapitre 4, on présente quelques résultats numériques concernant un modèle unidimensionnel décrivant un atome hydrogénoïde relativiste. En particulier, on propose une approche pour calculer la polarisation du vide ainsi que le décalage de Lamb dans une approximation de base finie.

Mots clés : analyse non linéaire, électrodynamique quantique, Hartree-Fock, approximation de champ moyen, mer de Dirac, régularisation ultraviolette

Some non-linear models on the Dirac vacuum

Abstract

This doctoral thesis is mainly devoted to the mathematical study of the Dirac vacuum, potentially in presence of an electromagnetic field and a finite number of electrons. This system is described by means of non-linear models originating from mean-field approximations of quantum electrodynamics. In Chapter 2, we study the dynamics of a finite number of relativistic electrons interacting with finitely many classical nuclei in the Dirac sea, by proving a global well-posedness result for the corresponding Cauchy problem. In Chapter 3, we provide the first rigorous derivation of the one-loop effective magnetic Lagrangian at positive temperature, a non-linear functional describing the free energy of the Dirac vacuum in a classical magnetic field. Finally, in Chapter 4, we present some numerical results concerning a one-dimensional model describing a relativistic hydrogen-like atom. In particular, we present an approach to compute the vacuum polarisation as well as the Lamb shift in a finite basis set approximation.

Keywords: non-linear analysis, quantum electrodynamics, Hartree-Fock, mean-field approximation, Dirac sea, ultraviolet regularisation

RÉSUMÉ

Cette thèse de doctorat est principalement consacrée à l'étude mathématique du vide de Dirac, potentiellement en présence d'un champ électromagnétique et d'électrons. Ce système est décrit à l'aide de modèles non linéaires issus d'approximations de champ moyen de l'électrodynamique quantique. Dans le Chapitre 2, on étudie la dynamique d'un nombre fini d'électrons relativistes interagissant avec un nombre fini de noyaux classiques dans la mer de Dirac, en prouvant que le problème de Cauchy correspondant est globalement bien posé. Dans le Chapitre 3, on fournit la première dérivation rigoureuse du lagrangien magnétique effectif à une boucle à température positive, une fonctionnelle non linéaire décrivant l'énergie libre du vide de Dirac dans un champ magnétique classique. Finalement, dans le Chapitre 4, on présente quelques résultats numériques concernant un modèle unidimensionnel décrivant un atome hydrogénoïde relativiste. En particulier, on propose une approche pour calculer la polarisation du vide ainsi que le décalage de Lamb dans une approximation de base finie.

MOTS CLÉS

analyse non linéaire, électrodynamique quantique, Hartree-Fock, approximation de champ moyen, mer de Dirac, régularisation ultraviolette

ABSTRACT

This doctoral thesis is mainly devoted to the mathematical study of the Dirac vacuum, potentially in presence of an electromagnetic field and a finite number of electrons. This system is described by means of non-linear models originating from mean-field approximations of quantum electrodynamics. In Chapter 2, we study the dynamics of a finite number of relativistic electrons interacting with finitely many classical nuclei in the Dirac sea, by proving a global well-posedness result for the corresponding Cauchy problem. In Chapter 3, we provide the first rigorous derivation of the one-loop effective magnetic Lagrangian at positive temperature, a non-linear functional describing the free energy of the Dirac vacuum in a classical magnetic field. Finally, in Chapter 4, we present some numerical results concerning a one-dimensional model describing a relativistic hydrogen-like atom. In particular, we present an approach to compute the vacuum polarisation as well as the Lamb shift in a finite basis set approximation.

KEYWORDS

non-linear analysis, quantum electrodynamics, Hartree-Fock, mean-field approximation, Dirac sea, ultraviolet regularisation