

7/10/80

I - 1

Introduction générale

A. Résumé du cours 1979-80

Au cours des dernières années, plusieurs physiciens ont essayé de construire des théories « semiclassiques » des interactions entre la matière et le rayonnement. Dans ces théories, l'évolution des corpuscules matériels, comme l'électron ou le proton, est régie par les équations de la mécanique quantique (équation de Schrödinger). Par contre, le rayonnement est traité comme une onde classique obéissant aux équations de Maxwell. Cette approche « mixte », quantique pour la matière, classique pour le rayonnement, s'est révélée très fructueuse : elle permet d'interpréter simplement et quantitativement de nombreux phénomènes comme l'effet photoélectrique, l'absorption et l'émission induite de rayonnement, l'effet laser, les non-linéarités optiques... sans qu'il soit nécessaire de faire intervenir le concept de photon, associé à la quantification du rayonnement. Certains physiciens sont même allés plus loin et ont prétendu pouvoir expliquer ainsi l'émission spontanée et les déplacements radiatifs (« déplacement de Lamb ») considérés habituellement comme étroitement liés à l'interaction de l'électron avec les fluctuations du vide du rayonnement quantique. Il a semblé intéressant de consacrer le cours de cette année à la discussion de ces divers problèmes. Le but fixé était d'essayer de dégager, dans les processus de détection et d'émission de rayonnement par des atomes, les aspects qui nécessitent réellement une quantification du rayonnement.

La première partie du cours a porté sur l'étude des signaux de photo-détection qui peuvent être observés à la sortie d'un photomultiplicateur, lorsque ce dernier est exposé à un rayonnement incident traité, soit classiquement (théorie « sans photons »), soit quantiquement (théorie « avec photons »). Plusieurs types de signaux ont été ainsi calculés : probabilité de détecter un photoélectron entre les instants t et $t + dt$, probabilité de détecter un photoélectron entre t_1 et $t_1 + dt_1$ *et* un autre photoélectron entre t_2 et $t_2 + dt_2$, probabilité de détecter n photoélectrons dans un intervalle T ... Les expressions obtenues pour ces signaux font intervenir des fonctions de corrélation, de complexité croissante, du rayonnement. Les analogies et différences entre fonctions de corrélation classiques et quantiques ont été analysées en détail, de manière à pouvoir identifier ensuite les effets spécifiquement quantiques apparaissant au niveau de la détection. Ainsi, des inégalités spécifiques des rayonnements classiques ont été établies. Toute expérience conduisant à des signaux qui violent ces inégalités peut donc être considérée comme apportant une preuve du caractère quantique du rayonnement.

Un premier exemple d'effet intéressant à cet égard est l'effet de groupement des photoélectrons, découvert par Hanbury Brown et Twiss il y a une vingtaine d'années. La théorie semiclassique prévoit en effet très simplement que, lorsqu'un rayonnement fluctuant incident donne naissance à un photoélectron à l'instant t , la probabilité d'observer un deuxième photoélectron un intervalle de temps τ après est plus grande pour τ court que pour τ long. En d'autres termes, la distribution des intervalles de temps τ entre deux photoélectrons successifs a un maximum en $\tau = 0$. Mathématiquement, une telle propriété résulte du fait que la moyenne du carré de l'intensité du rayonnement classique est supérieure (ou égale) au carré de l'intensité moyenne. Après un rappel des expériences de Hanbury Brown et Twiss et de leurs principales applications, on a alors décrit deux expériences beaucoup plus récentes conduisant à une violation des inégalités semiclassiques et mettant en évidence des « dégroupements » de photoélectrons. L'analyse détaillée de ces expériences montre que les effets quantiques ainsi mis en évidence ne peuvent se manifester clairement qu'avec des sources constituées d'un petit nombre d'atomes émetteurs. Ainsi, l'une des deux expériences, réalisées en 1977 par Kimble, Dagenais et Mandel, étudie

la lumière de fluorescence émise par un jet atomique irradié par un faisceau laser résonnant, la zone observée étant suffisamment petite pour ne contenir qu'un ou deux atomes émetteurs à chaque instant. Un calcul quantique détaillé de l'effet de dégroupement a été présenté. L'interprétation physique qui en résulte est très simple. La détection du premier photon constitue une signature d'un « saut quantique » de l'atome du niveau supérieur au niveau inférieur. Immédiatement après la première détection, l'atome est certainement dans le niveau inférieur et ne peut donc émettre un deuxième photon. Il faut attendre un certain temps pour que le faisceau laser le réexcite. On comprend ainsi pourquoi les photoélectrons sont « dégroupés ».

La conclusion qui se dégage des expériences précédentes est qu'il existe donc des rayonnements, en particulier ceux émis par un seul atome, qui ne peuvent être décrits classiquement. Le débat pourrait donc sembler clos, et la nécessité d'un traitement quantique démontrée. En fait, la situation est plus complexe. Les partisans des théories semiclassicals avancent en effet l'argument suivant : les effets quantiques révélés par les expériences mentionnées plus haut ne font que refléter la nature quantique des atomes émetteurs ; le champ rayonné par un dipôle atomique, étant proportionnel à ce dipôle, est un opérateur atomique. En termes plus mathématiques, les partisans des théories semiclassicals prétendent pouvoir formuler une théorie n'utilisant que l'espace de Hilbert de l'atome, évitant ainsi de quantifier le champ et d'introduire l'espace de Fock correspondant, avec toutes les difficultés conceptuelles liées aux fluctuations du vide. C'est à la discussion de ce problème qu'a été consacrée la dernière partie du cours, le but fixé étant de répondre à la question suivante : peut-on comprendre l'émission de rayonnement par un atome isolé sans faire appel à la quantification du rayonnement et aux fluctuations du vide ?

Partant des équations de Heisenberg couplées de l'atome et du rayonnement, on a commencé par calculer le champ créé par un dipôle atomique en tout point de l'espace, y compris à son propre emplacement. Le résultat obtenu est très simple. Le champ total \vec{E} est la somme de deux termes. Le premier, \vec{E}_0 , est indépendant du dipôle émetteur : on peut l'appeler le « champ du vide » (c'est la solution des équations de Maxwell sans termes sources). Le second, \vec{E}_s , est proportionnel au dipôle émetteur (et à ses dérivées successives) ; on peut l'appeler le « champ des sources », car c'est le champ rayonné par le dipôle atomique. L'interaction du dipôle émetteur avec son propre champ, c'est-à-dire avec le champ qu'il crée à son propre emplacement, n'est autre que la « réaction de rayonnement ». La théorie semiclassical, dite « champ des sources » (« source field »), traite le champ des sources \vec{E}_s comme un opérateur purement atomique, le champ du vide \vec{E}_0 comme un champ classique (égal à zéro dans le vide de rayonnement) ; elle essaie également d'interpréter les divers effets physiques associés à l'émission spontanée de rayonnement (largeur naturelle, déplacement de Lamb...) comme étant dus uniquement à la réaction de rayonnement. Les derniers cours ont été consacrés à une réfutation de cette théorie. Tout d'abord, on a montré qu'il n'était pas possible de traiter le champ du vide \vec{E}_0 comme une grandeur classique. En effet, les relations de commutation atomiques ne peuvent se conserver au cours du temps que si le champ du vide obéit de son côté aux relations de commutation du champ quantique. Un tel résultat est satisfaisant physiquement : quand deux systèmes interagissent (ici l'atome et le champ), traiter l'un quantiquement et l'autre classiquement conduit à des incohérences. De plus, on a montré que, si l'on traite \vec{E}_0 quantiquement, il est incorrect d'associer tous les effets physiques observables à la seule réaction de rayonnement. En imposant aux forces agissant sur l'atome et provenant respectivement du champ du vide \vec{E}_0 et du champ des sources \vec{E}_s d'être séparément hermitiques, c'est-à-dire d'avoir chacune un sens physique, on a obtenu une séparation non ambiguë entre les effets des fluctuations du vide et ceux de la réaction de rayonnement.

3. Objet du cours 1980-81

① Titre et but du cours

"Corrections radiatives stimulées et spontanées - Description par hamiltonien effectif"

Le but est d'essayer d'identifier, à la limite non relativiste, les mécanismes physiques responsables des corrections radiatives de l'électrodynamique quantique: déplacement de Lamb, anomalie $g-2$ de l'électron...

On introduira à ce propos la méthode de l'hamiltonien effectif dont le champ d'applications déborde largement celui des problèmes étudiés ici.

② Corrections radiatives stimulées

Que veut-on dire par là ?

Modification des propriétés d'un système atomique induite par l'interaction de ce système avec une onde électromagnétique incidente.

Exemples

- Déplacements de niveaux atomiques sous l'effet d'une irradiation lumineuse non-résonnante "light-shifts"
- Modification du facteur de Landé d'un niveau atomique par interaction avec un champ de radiofréquence non-résonnant.

Images physiques

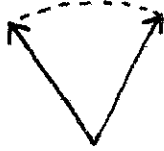
dans le cas où la fréquence ω de l'onde incidente est grande devant la fréquence propre ω_0 du système atomique.

- Vibration forcé de l'électron à la fréquence ω de l'onde incidente se superposant à un mouvement lent à la fréquence ω_0 dans le potentiel statique liant l'électron au noyau N



L'électron "explore" le potentiel du noyau sur une distance correspondant à l'amplitude de son mouvement de vibration. Il "voit" en moyenne un potentiel différent de celui qu'il "verrait" en l'absence d'onde incidente. Le mouvement rapide modifie le mouvement lent. On peut également dire que les propriétés dynamiques de l'électron, c-à-d sa réponse au potentiel statique, sont modifiées par l'onde incidente.

- Moment magnétique atomique oscillant rapidement à la fréquence ω dans un champ de radiofréquence $\vec{B}_1 \cos \omega t$ et précessant lentement à la fréquence ω_0 autour d'un champ statique \vec{B}_0 ($\omega_0 = -\gamma B_0 \ll \omega$)



$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times (\vec{B}_0 + \vec{B}_1 \cos \omega t)$$

$$\hookrightarrow \frac{d}{dt} M^2 = 0$$

\vec{M} évolue en gardant un module constant. Le mouvement rapide de \vec{M} à la fréquence ω est donc une oscillation angulaire. Ce qui compte pour l'interaction moyenne avec \vec{B}_0 , c'est la moyenne de \vec{M} sur une oscillation angulaire, et dont le module est nécessairement plus petit. L'interaction avec le champ de radiofréquence diminue donc le moment magnétique effectif de l'atome.

Quelques questions qu'on peut se poser

- Les images précédentes sont semi-classiques. Demeurent-elles valables lorsqu'on traite le champ incident quantiquement? Y a-t-il des effets quantiques?
- L'électron est à la fois une particule chargée et un spin porteur d'un moment magnétique. Y a-t-il des couplages entre le mouvement de vibration de la charge et le mouvement d'oscillation du spin?

③ Corrections radiatives spontanées.

Que veut-on dire par là?

Même en l'absence de tout rayonnement incident, de tout photon incident, l'électron continue à interagir avec le champ de rayonnement quantifié, et cette interaction est responsable de corrections que nous appellerons, pour les différencier des précédentes, corrections radiatives spontanées (comme pour l'émission spontanée, elles sont dues à l'interaction de l'électron avec le vide de rayonnement).

Exemples :- déplacement de Lamb entre les états $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène.
- anomalie $g-2$ du moment magnétique de spin de l'électron.
Ces 2 effets représentent des écarts par rapport aux prédictions de l'équation de Dirac

Traitement habituel de ces effets : formalisme covariant de l'électrodynamique quantique. Formalisme puissant mais se prêtant peu à des images physiques simples.

Peut-on établir un lien entre corrections stimulées et spontanées ?

Les corrections radiatives spontanées peuvent-elles être interprétées comme des corrections radiatives "stimulées" par les fluctuations du vide? (fluctuations du champ existant dans le vide de rayonnement et provenant du caractère quantique du champ).

1^{er} exemple conduisant à une réponse positive : Lamb-shift

Interprétation du Lamb-shift par Welton.

Moyennage du potentiel coulombien par le mouvement de vibration de l'électron induit par les fluctuations du vide. Moyennage conduisant à des corrections différentes pour les états s et p.

2^{ème} exemple conduisant à des difficultés : $g-2$

Un calcul analogue à celui de Welton conduit à une estimation de $g-2$ ayant le bon ordre de grandeur, mais le mauvais signe !

Le résultat expérimental est que $g-2$ est positif : le moment magnétique de spin est augmenté par les corrections radiatives spontanées. Un calcul "à la Welton" prévoit au contraire que le moment magnétique de spin est diminué. L'interprétation est la même que celle développée plus haut à propos des corrections radiatives stimulées : une oscillation angulaire du spin diminue toujours le moment magnétique effectif.

Questions que l'on peut se poser à propos du signe positif de $g-2$

- Pour comprendre le signe positif de $g-2$, ne faudrait-il pas faire un calcul plus élaboré que celui de Welton, tenant compte des corrections relativistes, des couplages éventuels entre le mouvement de vibration de la charge et le mouvement d'oscillation du spin? Ces couplages ne rétabliraient-ils pas le bon signe?
- L'électron interagit avec tous les modes du champ, les modes faiblement relativistes ($\hbar\omega \ll mc^2$), les modes relativistes ($\hbar\omega \geq mc^2$). Les contributions de ces divers modes ne pourraient-elles avoir des signes différents, les modes faiblement relativistes contribuant avec un signe négatif (en accord avec un calcul type Welton), les modes relativistes contribuant avec un signe positif et l'emportant dans l'intégrale?
En d'autres termes, l'interprétation du signe de $g-2$ ne nécessite-t-elle pas de prendre en compte les

modes relativistes pour lesquels un calcul de type Welton utilisant un hamiltonien non relativiste serait complètement inadapte?

- Image physique donnée par Koba et supportant ce point de vue.

Le spin de l'électron apparaît dans l'équation de Dirac comme étroitement lié au "Zitterbewegung": l'électron apparaît comme une "boule de courant", de dimensions \hbar/mc , parcourue à la vitesse c . Les fluctuations du vide de fréquence très élevée ($\hbar\omega \gg mc^2$) feraient vibrer l'électron le long de cette boule, augmentant la surface apparente de la boule, et donc son moment magnétique.



Le cours de cette année essaiera d'apporter des réponses, au moins partielles, aux diverses questions posées plus haut.

④ Liens avec le cours 1979-80

- Il a été montré l'an dernier qu'une distinction claire pouvait être établie entre 2 effets physiques apparaissant lors de l'interaction de l'électron avec le vide de rayonnement

- i) l'interaction de l'électron avec les fluctuations du vide
- ii) l'interaction de l'électron avec son propre champ, que l'on appelle encore réaction de rayonnement.

On essaiera cette année de poursuivre cette analyse et d'identifier dans le Lamb-shift et $g-2$ les contributions des fluctuations du vide et celle de la réaction de rayonnement

- On partait l'an dernier des équations de Heisenberg couplées de l'électron et du champ.

Ces équations étaient établies à partir d'un hamiltonien non relativiste, à l'approximation dipolaire électrique et sans aucun terme de spin. L'étude du signe de $g-2$ nécessite évidemment de tenir compte du spin et des couplages magnétiques. L'approximation dipolaire électrique n'est plus suffisante.

- Nous utiliserons cette année une méthode plus puissante et extrêmement générale, celle de l'hamiltonien effectif. Elle se révèle très bien adaptée à l'analyse des problèmes posés plus haut. De plus, elle permet d'établir très aisément, à partir de l'équation de Dirac, l'expression des premiers correctifs relativistes. Enfin elle se révélera très utile ultérieurement pour tenir compte des effets à plusieurs particules (créations virtuelles de paires)

Références générales - P. AVAN, C. COHEN-TANNOUDJI, J. DUPONT-ROC, C. FABRE
 Journal de Physique, 37, 993 (1976)
 - J. DUPONT-ROC, C. FABRE, C. COHEN-TANNOUDJI
 J. Phys. B 11, 563 (1978) et références in

14-10-80

II-1

Méthode de l'hamiltonien effectif

But de ce cours

- Introduire l'idée d'hamiltonien effectif et montrer comment on le calcule.
- Illustrer cette méthode sur un premier exemple très simple

Plan

- ① Introduction T1 à T5
Hypothèses sur l'hamiltonien non perturbé et la perturbation
Problème étudié ici
- ② Idee générale de la méthode T6 à T8
Transformation unitaire sur l'hamiltonien et diagonalisation "par blocs".
- ③ Calcul de l'hamiltonien effectif T9 à T15
sous forme d'un développement en puissances de la perturbation
- ④ Illustration sur un premier exemple très simple T16 à T26

Hamiltonien non perturbé H_0 (T1)

Niveaux groupés en multiplicités $E_\alpha^0, E_\beta^0 \dots$ bien séparés les uns des autres

$$E_\beta^0 \left\{ \begin{array}{c} \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{array} \right. \quad H_0 |i, \alpha\rangle = E_{i\alpha} |i, \alpha\rangle$$

$$E_\alpha^0 \left\{ \begin{array}{c} \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{array} \right. \quad |E_{j\beta} - E_{i\alpha}| \gg |E_{j\alpha} - E_{i\alpha}| \text{ si } \beta \neq \alpha$$

les nombres quantiques i, α sont en général relatifs à 2 types de degrés de liberté

α : Degrés de liberté de fréquence propre élevée

i : Degrés de liberté de fréquence propre basse

Quelques exemples physiques (T2)

Spins électroniques et nucléaires

α : nombres quantiques électroniques
 i : nombres quantiques nucléaires

Physique moléculaire

α : nombres quantiques électroniques
 i : nombres quantiques de vibration rotation

Electron faiblement lié en présence de rayonnement

α : nombre de photons de fréquence ω
 i : nombres quantiques de l'électron dans le potentiel externe

Théorie des champs

α : nombre d'excitations élémentaires (nombre de particules présentes)
 i : nombres quantiques de ces particules (impulsions, spins ...)

Perturbation λV

(λ : nombre réel sans dimension)

- A des éléments de matrice
- à l'intérieur de chaque multiplicité E_α^0
- entre multiplicités différentes E_α^0 et E_β^0

On suppose λ petit

$$\lambda |\langle i\alpha | V | j\beta \rangle| \ll |E_{i\alpha} - E_{j\beta}|$$

si $\alpha \neq \beta$

Donc, le spectre de

$$H = H_0 + \lambda V$$

est, comme celui de H_0 , formé de multiplicités bien séparées

$$E_\alpha, E_\beta, \dots$$

(T3) (T4)

(II-2)

Effets physiques de λV

- ① "Contamination" des variables lentes par les variables rapides et vice versa
(Conséquence de la modification des états propres)
Exemples physiques
- ② Modification des fréquences de Bohr
(Conséquence de la modification des valeurs propres)
Modification du mouvement lent due au mouvement rapide
Effet des "transitions virtuelles" induites par λV entre multiplicités différentes.

Problème étudié ici

(T5)

Modification des énergies à l'intérieur d'une multiplicité

Trouver les nouvelles fréquences de Bohr lentes en présence de λV .

Hamiltonien effectif \tilde{H}_{eff}

C'est un opérateur défini à l'intérieur de la multiplicité non perturbée E_α^0 , et tel que ses valeurs propres coïncident avec celles de H à un ordre donné en λ

\tilde{H}_{eff} est un hamiltonien n'agissant que sur les degrés de liberté "lents" et incorporant les effets du couplage avec les degrés de liberté rapides.

Transformation unitaire e^{iS}

(T6)

$$\tilde{H} = e^{iS} H e^{-iS} \text{ avec } S = S^\dagger$$

\tilde{H} et H ont le même spectre

Comment choisir e^{iS} ?

- On essaie d'annuler, à un ordre donné p en λ , les éléments non diagonaux de \tilde{H} entre multiplicités différentes E_α^0 E_β^0

$$\langle i\alpha | \tilde{H} | j\beta \rangle = C \lambda^p + D \lambda^{p+1} + \dots$$

Condition 1

Éléments de matrice non diagonaux de \tilde{H} s'annulant comme λ^p si $\lambda \rightarrow 0$

- Il en résulte alors que la "restriction de \tilde{H} à E_α^0

$$P_\alpha^0 \tilde{H} P_\alpha^0 \text{ avec } P_\alpha^0 = \sum_i |i\alpha\rangle \langle i\alpha|$$

est un hamiltonien effectif correct à l'ordre p inclus

"Diagonalisation par blocs" de \tilde{H} dans la base non perturbée $\{|i\alpha\rangle\}$

Arbitraire sur le choix de e^{iS} (T7)

Si la condition 1 est satisfaite par e^{iS} , elle est également satisfaite par $e^{iS} e^{iT}$, où T laisse invariants $E_\alpha^0, E_\beta^0 \dots$

On réduit cet arbitraire en imposant à S d'être purement non diagonale

$$\langle i\alpha | S | j\beta \rangle = 0 \quad \text{si } \alpha \neq \beta$$

Récapitulation : conditions sur S

Condition 1

Si $\alpha \neq \beta$, $\langle i\alpha | e^{iS} H e^{-iS} | j\beta \rangle$ s'annule en λ^p quand $\lambda \rightarrow 0$

Condition 2

$$\langle i\alpha | S | j\beta \rangle = 0 \quad \text{si } \alpha \neq \beta$$

Remarque sur les vecteurs propres (T8)

Les valeurs propres de l'hamiltonien effectif $P_\alpha^0 \tilde{H} P_\alpha^0$ coïncident à l'ordre p inclus en λ avec celles de H . Par contre, les vecteurs propres de $P_\alpha^0 \tilde{H} P_\alpha^0$ et ceux de H diffèrent

Si l'on est intéressé par les vecteurs propres de H , on peut les obtenir par action de e^{-iS} sur les vecteurs propres de $P_\alpha^0 \tilde{H} P_\alpha^0$ (en effet $H = e^{-iS} \tilde{H} e^{iS}$)

Une formule utile (T9)

$$e^{iS} H e^{-iS} = H + i[S, H] + \frac{i^2}{2!} [S, [S, H]] + \frac{i^3}{3!} [S, [S, [S, H]]] + \dots$$

Démonstration

$$F(\lambda) = e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} \right)_{\lambda=0}$$

$$\text{Or, } \frac{\partial F}{\partial \lambda} = e^{i\lambda S} i[S, H] e^{-i\lambda S}$$
$$\frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2} = e^{i\lambda S} i^2 [S, [S, H]] e^{-i\lambda S}$$
$$\vdots$$

D'où l'on tire

$$F(\lambda) = e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (i)^n \underbrace{[S, [S, [S, \dots [S, H]]]}_{n \text{ fois}}$$

Il suffit alors de faire $\lambda = 1$

Recherche de S sous la forme (T10)

$$S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \lambda^3 S_3 + \dots$$

Calcul de \tilde{H}

$$\tilde{H} = e^{iS} (H_0 + \lambda V) e^{-iS} = H_0 + \lambda V + i[S, H_0 + \lambda V] + \frac{i^2}{2!} [S, [S, H_0 + \lambda V]] + \dots$$

Ordre 0 $\tilde{H}_0 = H_0$

Ordre 1 $\tilde{H}_1 = i[S_1, H_0] + V$

Ordre 2 $\tilde{H}_2 = i[S_2, H_0] + i[S_1, V] + \frac{i^2}{2} [S_1, [S_1, H_0]]$

Ordre 3 $\tilde{H}_3 = i[S_3, H_0] + i[S_2, V] + \frac{i^2}{2} [S_1, [S_2, H_0]] + \frac{i^2}{2} [S_2, [S_1, H_0]] + \frac{i^2}{2} [S_1, [S_1, V]] + \frac{i^3}{6} [S_1, [S_1, [S_1, H_0]]]$

Ordre 1 $\tilde{H}_1 = i[S_1, H_0] + V$

T11 T12

Ordre 2

II-4

Calcul de $P_\alpha^0 \tilde{H}_1 P_\alpha^0$

$$\langle i\alpha | \tilde{H}_1 | j\alpha \rangle = i \underbrace{\langle i\alpha | S_1 | j\alpha \rangle}_{=0 \text{ d'après condition 2}} (E_{j\alpha} - E_{i\alpha})$$

$$+ \langle i\alpha | V | j\alpha \rangle$$

On en déduit

$$H_{\text{eff}}^\alpha = H_0 P_\alpha^0 + \lambda P_\alpha^0 V P_\alpha^0$$

à l'ordre 1 inclus en λ

Calcul de $P_\alpha^0 \tilde{H}_1 P_\beta^0$ avec $\beta \neq \alpha$

On veut

$$\langle i\alpha | \tilde{H}_1 | j\beta \rangle = 0 \quad (\text{condition 1})$$

ce qui détermine S_1

$$\langle i\alpha | S_1 | j\beta \rangle = -i \frac{\langle i\alpha | V | j\beta \rangle}{E_{i\alpha} - E_{j\beta}}$$

$$\tilde{H}_2 = i[S_2, H_0] + i[S_1, V] + \frac{i^2}{2} [S_1, [S_1, H_0]]$$

Calcul de $P_\alpha^0 \tilde{H}_2 P_\alpha^0$

$$\langle i\alpha | [S_2, H_0] | j\alpha \rangle = (E_{j\alpha} - E_{i\alpha}) \langle i\alpha | S_2 | j\alpha \rangle$$

(condition 2) $\rightarrow = 0$

Comme S_1 est connue par le calcul d'ordre 1, les 2 autres termes sont aussi connus

On en déduit H_{eff}^α à l'ordre 2 inclus en λ

Calcul de $P_\alpha^0 \tilde{H}_2 P_\beta^0$ ($\alpha \neq \beta$)

La condition (1), $\langle i\alpha | \tilde{H}_2 | j\beta \rangle = 0$ permet de calculer $\langle i\alpha | S_2 | j\beta \rangle$ nécessaire pour le calcul de H_{eff}^α à l'ordre 3

Et ainsi de suite ...

Calcul de H_{eff}^α à l'ordre 2

T13

$$\langle i\alpha | \tilde{H}_2 | j\alpha \rangle =$$

$$\langle i\alpha | iS_1 V - iV S_1 - \frac{1}{2} S_1^2 H_0 - \frac{1}{2} H_0 S_1^2 + S_1 H_0 S_1 | j\alpha \rangle$$

$$\text{Or } \langle i\alpha | S_1 | k\beta \rangle = -i \frac{\langle i\alpha | V | k\beta \rangle}{E_{i\alpha} - E_{k\beta}}$$

$$\text{D'où } \langle i\alpha | \tilde{H}_2 | j\alpha \rangle =$$

$$\sum_{\beta \neq \alpha} \sum_k \left\{ \frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\beta}} + \frac{1}{E_{j\alpha} - E_{k\beta}} - \frac{1}{2} \frac{E_{j\alpha} + E_{i\alpha} - 2E_{k\beta}}{(E_{i\alpha} - E_{k\beta})(E_{j\alpha} - E_{k\beta})} \right\}$$

On démontre aisément que

$$\left\{ \right\} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\beta}} + \frac{1}{E_{j\alpha} - E_{k\beta}} \right]$$

Récapitulation pour H_{eff}^α

T14

$$\langle i\alpha | H_{\text{eff}}^\alpha | j\alpha \rangle =$$

$$E_{i\alpha} \delta_{ij}$$

$$+ \lambda \langle i\alpha | V | j\alpha \rangle$$

$$+ \lambda^2 \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ k}} \langle i\alpha | V | k\beta \rangle \langle k\beta | V | j\alpha \rangle \times \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\beta}} + \frac{1}{E_{j\alpha} - E_{k\beta}} \right)$$

+ ...

Si $i = j$, on retrouve le résultat de la théorie des perturbations

Si $i \neq j$, on voit apparaître la demi-somme de 2 dénominateurs d'énergie, l'un relatif à $i\alpha$, l'autre à $j\alpha$.

Très souvent,

$$E_{i\alpha} - E_{k\beta} = \Delta_{\alpha\beta} + E_i - E_k$$

Comme $|\Delta_{\alpha\beta}| \gg |E_i - E_k|$ si $\alpha \neq \beta$
on peut écrire

$$\frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\beta}} = \frac{1}{\Delta_{\alpha\beta} + E_i - E_k} = \frac{1}{\Delta_{\alpha\beta}} - \frac{E_i - E_k}{\Delta_{\alpha\beta}^2} + \frac{(E_i - E_k)^2}{\Delta_{\alpha\beta}^3} + \dots$$

Double développement de H_{eff}

- en puissances de $\lambda V / \Delta$
- en puissances de $(E_i - E_k) / \Delta$

Très souvent également,

possibilité d'obtenir une forme opératoire pour H_{eff}
(opérateurs agissant uniquement sur les nombres quantiques i, j, \dots)

(T15)

(T16)

(II-5)

Illustration sur un 1^{er} exemple très simple

Système étudié

- 2 spins électroniques $\frac{1}{2}$: \vec{S}_1 et \vec{S}_2
couplés par une interaction "d'échange"
 $H_0 = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

- Chacun de ces spins électroniques est couplé à un spin nucléaire par une interaction hyperfine

$$V = A_1 \vec{I}_1 \cdot \vec{S}_1 + A_2 \vec{I}_2 \cdot \vec{S}_2$$

Hypothèses

- (i) $J \gg A_1, A_2$ (origine électrostatique de J)
- (ii) On "oublie" tous les degrés de liberté orbitaux

Problème très simple, ne faisant intervenir que des spins

Possibilité de modèle plus élaborés, plus proches de la réalité

Niveaux d'énergie de H_0

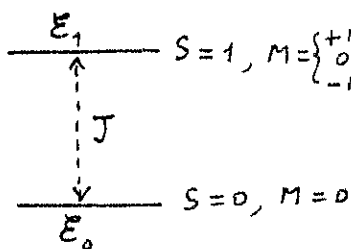
(T17)

Spin électronique total $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$

2 multiplicités

E_0 et E_1

séparés par J



2 types de nombres quantiques

Électroniques : S, M

Nucléaires : m_{I_1}, m_{I_2}

Multiplicité E_0

- Comme $\langle S=0 | \vec{S}_i | S=0 \rangle = 0$
aucun paramagnétisme électronique

État fondamental diamagnétique du point de vue électronique

- Dégénérescence purement nucléaire : $(2I_1 + 1)(2I_2 + 1)$

Effet de V dans E_0

(T18)

Décrit par l'hamiltonien effectif

$$P_0 H_{eff} P_0 = \underbrace{P_0 V P_0}_{=0} + \frac{P_0 V P_1 V P_0}{E_0 - E_1} + \dots$$

car $P_0 \vec{S}_i P_0 = 0$ $\underbrace{E_0 - E_1}_{=-J}$

P_i : projecteur sur E_i

Au 2nd ordre, l'interaction hyperfine lève partiellement la dégénérescence : V "ramène" dans E_0 une partie du paramagnétisme électronique de E_1 , qui peut alors agir sur \vec{I}_1 et \vec{I}_2 .

Problème posé

Peut-on décrire l'effet de V par un hamiltonien effectif purement nucléaire, qui décrirait une interaction "effective" entre les 2 spins nucléaires ? (à ne pas confondre avec une interaction magnétique directe, du type dipôle-dipôle)

Hamiltonien effectif dans E_0

[T19]

$$H_{eff} = - \sum_{\substack{i,j=1,2 \\ a,b=x,y,z \\ M=-1,0,+1}} \frac{A_i A_j}{J} I_{ia} I_{jb} \times \langle S=0 | S_{ia} | S=1, M \rangle \langle S=1, M | S_{jb} | S=0 \rangle$$

Element de matrice électronique
On peut rajouter le terme nul $\langle S=0 | S_{ia} | S=0 \rangle \langle S=0 | S_{jb} | S=0 \rangle$
et faire apparaitre la relation

$$\sum_n |S=1, M\rangle \langle S=1, M| + |S=0\rangle \langle S=0| = 1$$

de sorte que

$$H_{eff} = - \sum_{\substack{i,j=1,2 \\ a,b=x,y,z}} \frac{A_i A_j}{J} I_{ia} I_{jb} \times \langle S=0 | S_{ia} S_{jb} | S=0 \rangle$$

Valeur moyenne dans E_0 d'une grandeur électronique.

[T20]

[II-6]

Invariance par rotation de $|S=0\rangle$

$$\begin{aligned} \langle S=0 | S_{ia} S_{jb} | S=0 \rangle &= \delta_{ab} \langle S=0 | S_{ia} S_{ja} | S=0 \rangle = \\ &= \frac{1}{3} \delta_{ab} \langle S=0 | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | S=0 \rangle \\ &= \begin{cases} \frac{\delta_{ab}}{3} \frac{3}{4} = \frac{\delta_{ab}}{4} & \text{si } i=j \\ \frac{\delta_{ab}}{3} \left(-\frac{3}{4}\right) = -\frac{\delta_{ab}}{4} & \text{si } i \neq j \end{cases} \end{aligned}$$

Expression finale de H_{eff}

$$H_{eff} = \mathcal{E} + \mathcal{A} \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2$$

\mathcal{E} et \mathcal{A} 2 constantes données par

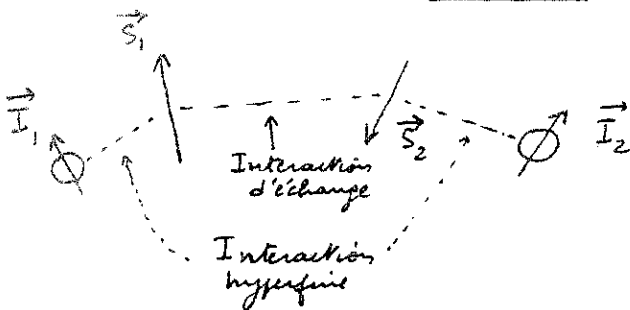
$$\begin{cases} \mathcal{E} = -\frac{1}{4J} [A_1^2 I_1(I_1+1) + A_2^2 I_2(I_2+1)] \\ \mathcal{A} = \frac{A_1 A_2}{J} \end{cases}$$

Interprétation physique

[T21]

\mathcal{E} : Déplacement global de E_0
(vers le bas si $J > 0$)

$\mathcal{A} \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2$: Interaction effective entre \vec{I}_1 et \vec{I}_2
Interaction indirecte



\vec{I}_1 " polarise le système électronique
la polarisation ainsi créée réagit sur \vec{I}_2

Effet d'un champ magnétique

[T22]

Introduit une perturbation supplémentaire : $W = W_e + W_n$

$$W_e = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

$$W_n = \omega_{n1} I_{1z} + \omega_{n2} I_{2z}$$

ω_i : Fréquence de Larmor du spin électronique i

ω_{ni} : Fréquence de Larmor du noyau i

Ordres de grandeur

$$\omega_1, \omega_2 \ll J$$

$$\omega_{ni} \ll \omega_i$$

Magnétisme nucléaire \ll Magnétisme électronique

Hamiltonien total

$$H_0 + V + W$$

\uparrow \uparrow \uparrow
 Echange Interaction hyperfine Interaction Zeeman

Hamiltonien effectif

T23

$$P_0 H_{\text{eff}} P_0 = P_0 (V+W) P_0 - \frac{1}{J} P_0 (V+W) P_1 (V+W) P_0 + \dots$$

$$P_0 (V+W) P_0 = \omega_{n1} I_{13} + \omega_{n2} I_{23}$$

Dans le terme d'ordre 2, on peut négliger ω_{n1} et ω_{n2} , ce qui permet de l'écrire

$$- \frac{1}{J} P_0 (V+W_e)^2 P_0$$

Terme en W_e^2 : déplacement global de E_0

Terme intéressant nouveau

$$- \frac{1}{J} P_0 (V W_e + W_e V) P_0$$

Décrit un magnétisme nucléaire effectif (corrigeant ω_{n1} et ω_{n2}) et due au magnétisme électronique de E_1 , ramené dans E_0 .

Analogie avec le "déplacement chimique" en RMN

Interprétation physique

T25

Le champ appliqué H_0 polarise l'état électronique fondamental et fait apparaître un magnétisme électronique induit (proportionnel à H_0) qui interagit alors avec les spins nucléaires par l'intermédiaire du couplage hyperfin.

Autre "ordre" possible: le couplage hyperfin polarise E_0 , le magnétisme induit interagit alors avec H_0 .

Cas $\omega_1 = \omega_2 = \omega_e$

$W_e = \omega_e (S_{13} + S_{23})$ commute alors avec H_0 et ne relie plus E_0 à E_1 .

On peut alors diagonaliser exactement $H_0 + W_e$ et étudier ensuite l'effet de V en développant les dénominateurs d'énergie en puissances de $\frac{\omega_e}{J}$. On trouve alors pour correction à l'Hamiltonien Zeeman nucléaire

$$\omega_e \frac{A_1^2}{4J^2} I_{13} + \omega_e \frac{A_2^2}{4J^2} I_{23}$$

T24

Hamiltonien Zeeman nucléaire effectif

II-7

$$\omega_{n1} I_{13} + \omega_{n2} I_{23}$$

$$- \sum_{\substack{i,j=1,2 \\ a=x,y,z}} \frac{A_i \omega_j}{J} I_{ia} \times \langle S=0 | S_{ia} S_{jz} + S_{jz} S_{ia} | S=0 \rangle$$
$$= \frac{2}{3} \delta_{az} \langle S=0 | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | S=0 \rangle$$
$$= \begin{cases} \frac{1}{2} \delta_{az} & \text{si } i=j \\ -\frac{1}{2} \delta_{az} & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

On obtient ainsi finalement

$$I_{13} \left[\omega_{n1} - \frac{A_1 (\omega_1 - \omega_2)}{2J} \right]$$

$$+ I_{23} \left[\omega_{n2} - \frac{A_2 (\omega_2 - \omega_1)}{2J} \right]$$

Comme ω_{n1} , ω_{n2} , ω_1 , ω_2 sont proportionnels au champ appliqué H_0 , corrections équivalentes à un changement des rapports gyromagnétiques nucléaires.

Problème physiques

T26

appartient au modèle schématisé précédent

- Interaction effective entre spins nucléaires dans une substance diamagnétique
Déplacement chimique en RMN

A. Abragam - Principles of Nuclear Magnetism (Oxford at the Clarendon Press)

p. 173 - 191 et références in

- Hamiltoniens effectifs Zeeman et hyperfin dans les molécules diatomiques

M. Broger, J. Vigué, J.-C. Lehmann
J. de Phys. 39, 591 (1978)

M. Broger Thèse Paris 1977
chapitres II et III

J. Vigué Thèse Paris 1978
Chapitre I

21.10.80

Exemples d'application de la méthode de l'hamiltonien effectif.

But de ce cours

Montrer la richesse de cette méthode en l'illustrant sur de nombreux exemples.
L'accent est mis plus sur les idées physiques que sur le détail des calculs

Plan

- ① Premier exemple : interactions effectives entre électrons d'un métal par échange de phonons (T1 à T13)
- ② Etude d'un autre problème très analogue au précédent : Potentiel de Yukawa (T14 à T19)
- ③ Autre exemple : interaction de Ruderman - Kittel entre spins nucléaires dans un métal (T20 à T25)
- ④ Autre problème très voisin : interaction d'échange indirecte entre ions paramagnétiques dans un métal (T26)

Premier exemple

Attraction effective entre électrons d'un métal par échange de phonons.

Importance de cette attraction effective entre électrons pour la compréhension du phénomène de supraconductivité

Références

C. KITTEL Quantum theory of solids
chapitres 7 et 8
et références en

(T1)

Interactions électron-ion dans un métal

- Ions fixés à leurs positions d'équilibre \vec{R}_i^0

$$H_{\text{electron}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \sum_i v(\vec{r} - \vec{R}_i^0)$$

Energie cinétique de e Couplage e-ion i

les ions en \vec{R}_i^0 forment un réseau périodique \rightarrow électron dans un potentiel périodique

"Bandes" d'énergie $H_e |\vec{k}\rangle = E_k |\vec{k}\rangle$

- Ions déplacés de leur position d'équilibre

$$\delta \vec{R}_i = \vec{R}_i - \vec{R}_i^0 \quad \text{écart jacobin}$$

$$\sum_i v(\vec{r} - \vec{R}_i) = \sum_i v(\vec{r} - \vec{R}_i^0) - \underbrace{\sum_i \delta \vec{R}_i \cdot \vec{\nabla} v(\vec{r} - \vec{R}_i^0)}_{\delta V} + \dots$$

δV : potentiel perturbateur lié aux déplacements des ions. linéaire en $\delta \vec{R}_i$

Comment les $\delta \vec{R}_i$ évoluent-ils ?

Dynamique du réseau - Phonons (T3)

- Les ions sont en mouvement.
 Couplés les uns aux autres. Minimum d'énergie potentielle pour $\vec{R}_i = \vec{R}_i^0$

Les évolutions des $\delta \vec{R}_i$ ne sont pas indépendantes. Possibilité

(approximation harmonique) d'introduire des combinaisons linéaires les $\delta \vec{R}_i$ qui évoluent de manière indépendante

"Modes" collectifs de vibration du réseau

Hamiltonien du réseau : équivalent à celui d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants

$$H_{\text{réseau}} = \sum_{\vec{q}} \frac{1}{2} \Omega_{\vec{q}}^2 (b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2})$$

$b_{\vec{q}}^{\dagger}$: Op. de création d'un phonon \vec{q} , $\Omega_{\vec{q}}$

$b_{\vec{q}}$: Op. de destruction " " " "

Phonons : excitations élémentaires du réseau

Interactions électron-phonon (III-2)

Les $b_{\vec{q}}$ et $b_{\vec{q}}^{\dagger}$ sont des combinaisons linéaires des $\delta \vec{R}_i$ et \vec{P}_i (impulsions)

Réciproquement, on a :

$$\delta \vec{R}_i = \sum_{\vec{q}} N_{\vec{q}} \vec{E}_{\vec{q}} (b_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^0} + b_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^0})$$

$N_{\vec{q}}$: coeff. de normalisation $\vec{E}_{\vec{q}}$: polarisation

$$\delta V = - \sum_{\vec{q}} \sum_i N_{\vec{q}} b_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^0} \vec{E}_{\vec{q}} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r} - \vec{R}_i^0) + h.c.$$

δV agit à la fois

- sur les variables du réseau : changement du nombre de phonons de ± 1 .

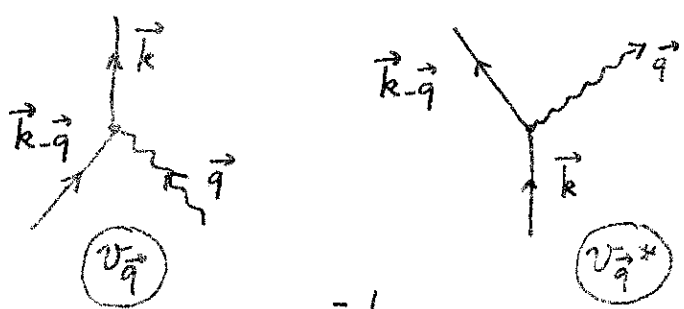
- sur les variables électroniques (\vec{r} apparaît dans δV).

Conservation du vecteur \vec{k} global liée aux symétries (translations)

Éléments de matrice de δV (T5)

Descriptif des processus où l'électron change d'état, un phonon \vec{q} étant créé ou détruit

Électrons : traits pleins
 Phonons : lignes ondulées



$$V_{\vec{q}} = -N_{\vec{q}} \langle 0_{\vec{q}} | b_{\vec{q}} | 1_{\vec{q}} \rangle \times \langle \vec{k} | \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^0} \vec{E}_{\vec{q}} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r} - \vec{R}_i^0) | \vec{k} - \vec{q} \rangle$$

Écriture de V en "seconde quantification" (T6)

$$\delta V = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} (V_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + V_{\vec{q}} b_{\vec{q}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}-\vec{q}})$$

$a_{\vec{k}}^{\dagger}$: Op. de création d'un électron dans l'état \vec{k}

$a_{\vec{k}}$: Op. de destruction " " "

δV agit sur les nombres d'occupation des états du système électronique + phonons

Tient compte des principes de Pauli
 Relations d'anticommutation

$$[a_{\alpha}, a_{\beta}]_{+} = [a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\beta}^{\dagger}]_{+} = 0 \quad [a_{\alpha}, a_{\beta}^{\dagger}]_{+} = \delta_{\alpha\beta}$$

Hamiltonien du système global

$$H = H_0 + \delta V$$

$$H_0 = \underbrace{\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}}_{\text{Electrons}} + \underbrace{\sum_{\vec{q}} \frac{1}{2} \Omega_{\vec{q}}^2 (b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2})}_{\text{Phonons}}$$

Opérateurs à 2 corps [T7] pour 1 système de N particules identiques

G : opérateur agissant sur 2 particules à la fois

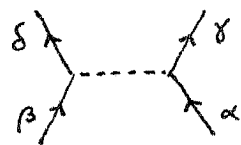
$$G = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} g(i, j)$$

Somme sur les particules

Éléments de matrice de G

$$\langle \gamma \delta | g | \alpha \beta \rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_\gamma^*(\vec{r}_1) \varphi_\delta^*(\vec{r}_2) g(\vec{r}_1, \frac{1}{2}\vec{v}_1; \vec{r}_2, \frac{1}{2}\vec{v}_2) \varphi_\alpha(\vec{r}_1) \varphi_\beta(\vec{r}_2)$$

Représentation de $\langle \gamma \delta | g | \alpha \beta \rangle$



Écriture de G en seconde quantification

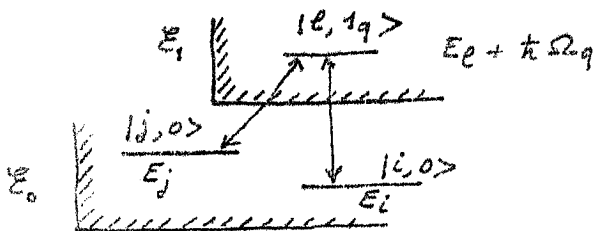
$$G = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} \dots$$

Somme sur les états

$$\langle \gamma \delta | g | \alpha \beta \rangle a_\gamma^+ a_\delta^+ a_\beta a_\alpha$$

a_μ^+ : Op. de création d'une particule dans l'état μ
 a_ν : Op. de destruction

Expression de Hoff [T9]



$$\langle j, 0 | H_{\text{eff}} | i, 0 \rangle = \langle j, 0 | \delta V | i, 0 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\ell} \sum_{q} \dots$$

$$\sum_{k'} v_q b_q a_{k+q}^+ a_{k'} \quad \sum_k v_q^* b_q^+ a_{k-q}^+ a_k$$

$$\langle 0 | b_q | 1_q \rangle \langle 1_q | b_q^+ | 0 \rangle = 1$$

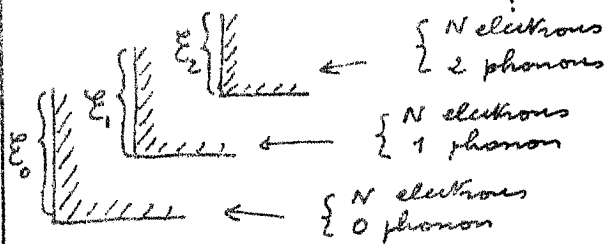
Pour chaque terme $a_{k-q}^+ a_k$ de la somme sur k, il existe un seul état l pour lequel $\langle l | a_{k-q}^+ a_k | i \rangle \neq 0$. Et on a alors

$$E_i - E_j - \Omega_q = E_k - E_{k-q} - \Omega_q$$

Même raisonnement pour $\langle j | a_{k+q}^+ a_{k'} | i \rangle$

$$E_i - E_j - \Omega_q = E_{k'+q} - E_{k'} - \Omega_q$$

Multiplicités non-perturbées [III-3] du système électrons-phonons



A très basse température ($T \sim 0^\circ \text{K}$), seule, la multiplicité E_0 est occupée

Effet de δV

δV couple E_0 et E_1

L'effet de δV sur E_0 (au 2^{ème} ordre) peut être décrit par un hamiltonien effectif n'agissant que dans E_0 .

Effet des émissions et réabsorptions virtuelles de phonons décrit par un hamiltonien effectif purement électronique.

Expression de Hoff [T-10]

en seconde quantification

Lorsqu'on fixe $\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}'$, les dénominateurs d'énergie ont une valeur bien déterminée qui ne dépend que de $\vec{q}, \vec{k}, \vec{k}'$.

Il n'est donc pas nécessaire de spécifier i et j. La somme sur l fait apparaître une relation de fermeture intermédiaire. Ainsi,

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} \sum_q a_{k+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k \times |v_q|^2 \left[\frac{1}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q} + \frac{1}{E_{k'+q} - E_{k'} - \Omega_q} \right]$$

Mettons tous les a^+ à gauche, tous les a à droite

$$a_{k'} a_{k-q}^+ = -a_{k-q}^+ a_{k'} + \delta_{k-k'-q}$$

D'où l'on tire

$$a_{k+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k = a_k^+ a_k \delta_{k-k'-q} + a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Expressions finale pour H_{eff}^1

T-11 T-12

Interprétation physique de H_{eff}^1

III-4

$$H_{eff} = H_{eff}^1 + H_{eff}^2$$

$$H_{eff}^1 = \sum_k \sum_q a_k^+ a_k \frac{|V_q|^2}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q}$$

Hamiltonien effectif à 1 particule

Pour l'autre terme, on change \vec{k} en \vec{k}' et vice versa, \vec{q} en $-\vec{q}$. On utilise $\Omega_q = \Omega_{-q}$ $|V_q|^2 = |V_{-q}|^2$

On peut alors remplacer le 2^{ème} dénominateur d'énergie par $1/(E_{k-q} - E_k - \Omega_q)$ et on obtient finalement

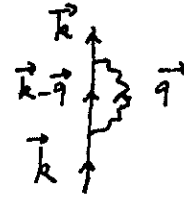
$$H_{eff}^2 = \sum_k \sum_{k'} \sum_q \frac{|V_q|^2 \Omega_q}{(E_k - E_{k-q})^2 - \Omega_q^2} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Même forme qu'un opérateur à 2 corps décrivant une interaction entre électrons

$$\sum_k E_k a_k^+ a_k + H_{eff}^1 = \sum_k (E_k + \delta E_k) a_k^+ a_k$$

avec $\delta E_k = \sum_q \frac{|V_q|^2}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q}$

Modification de l'énergie de l'état électronique \vec{k} due à l'émission et à la réabsorption virtuelle d'un photon par l'électron dans l'état k



Electron "habillé" par un nuage de phonons virtuels

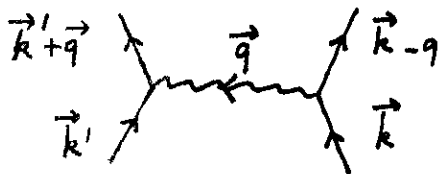
"Polaron"

Propriétés physiques différentes de celles de l'électron "nu".

Interprétation physique de H_{eff}^2

T-13

Interaction effective entre 2 électrons due à l'échange d'un phonon virtuel



Un électron déforme le réseau derrière lui. La déformation ainsi créée interagit avec un 2^{ème} électron

Approximations couramment faites

- Ω_q indépendant de q (phonons optiques)
- Les états électroniques qui interviennent sont au voisinage du niveau de Fermi dans une bande d'énergie de largeur faible devant Ω_q . On néglige $(E_k - E_{k-q})^2$ devant Ω_q^2

$$H_{eff} = \sum_{k, k'} \sum_q - \frac{|V_q|^2}{\Omega_q} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Interaction attractive

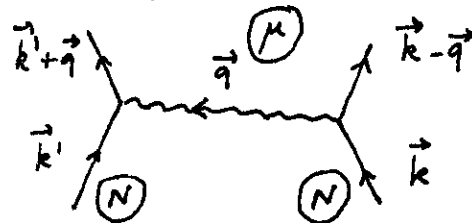
Etude d'un autre problème

T-14

analogue au précédent

Potentiel de Yukawa

Interaction entre 2 particules (très massives) N par l'intermédiaire de l'échange d'une particule μ



Modèle très schématisé pour décrire l'interaction entre 2 nucléons résultant de l'échange de mésons.

Hamiltonien

Comme plus haut
 $H = H_0 + \delta V$

$$H_0 = \underbrace{\sum_k E_k^+ a_k^+ a_k^+}_{\text{Particules } N} + \underbrace{\sum_q \hbar \Omega_q b_q^+ b_q^+}_{\text{Particules } \mu}$$

Masse au repos M_0
Masse au repos m_0

Energie relativiste

$$E_k^+ = \sqrt{M_0^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k^2} \quad \hbar \Omega_q = \sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2 c^2 q^2}$$

$$\delta V = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V_q^* b_q^+ a_{\vec{k}-\vec{q}}^+ a_{\vec{k}}^+ + h.c.$$

Processus élémentaires d'émission ou d'absorption de μ par des N

Dépendance en q de l'amplitude V_q
 (Se démontre aisément à partir d'arguments relativistes):

$$V_q \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega_q}}$$

T-15 | T-16

Interaction effective

Un calcul identique en tous points au précédent conduit à

$$H_{\text{eff}}^2 = \sum_{q, q', k} \frac{|V_q|^2 \Omega_q}{(E_k - E_{k-q})^2 - \Omega_q^2} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Hypothèse sur les particules N : elle sont très massives ($M_0 \gg m_0$).

Elles ne reculent pratiquement pas quand elles émettent ou absorbent une particule μ

On peut donc valablement négliger $(E_k - E_{k-q})^2$ devant Ω_q^2

Comme $V_q \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega_q}}$, on obtient finalement

$$H_{\text{eff}}^2 \sim \sum_{k, k', q} - \frac{1}{\Omega_q^2} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Peut-on interpréter le résultat précédent en termes d'un potentiel $W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ ne dépendant que de la position relative des 2 particules?

Si cela était vrai, l'amplitude $\frac{1}{\Omega_q^2}$ du processus



pourrait s'écrire également

$$\int d^3 r_1 d^3 r_2 [e^{i(\vec{k}+\vec{q}) \cdot \vec{r}_2} e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{r}_1}]^* W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) [e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1}]$$

$$\sim \int d^3 p W(\vec{p}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{p}}$$

Transformée de Fourier spatiale du potentiel

T-17

Conclusion

L'interaction entre particules N par échange de μ peut être décrite par un potentiel $W(\vec{r})$ donné par la T.F. de

$$\frac{1}{\Omega_q^2} \sim \frac{1}{q^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}}$$

Donc

$$W(r) \sim \int d^3 q \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{q^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}} \sim \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

avec $r_0 = \frac{\hbar}{mc}$ longueur d'onde de Compton de μ

Potentiel de Yukawa de portée r_0 finie

Interprétation en termes de transitions virtuelles

T-18

Limite $m_0 \rightarrow 0$

Si $m_0 \rightarrow 0$, $r_0 \rightarrow \infty$

Le potentiel de Yukawa tend, à la limite $m_0 \rightarrow 0$, vers un potentiel coulombien en $\frac{1}{r}$

Les forces électromagnétiques, à longue portée, s'interprètent bien comme résultant d'un échange de particules de masse au repos nulle, les photons

T-19

T-20

Autre exemple

III-6

Interaction de Ruderman - Kittel entre spins nucléaires dans un métal

Références

Ruderman Kittel - Phys Rev 96, 99 (1954)
 Kittel - Théorie quantique du solide p. 381
 Abragam - Principes of nuclear magnetism p. 206

Modèle très simple

Gaz d'électrons libres dans une boîte

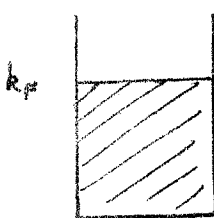


2 spins nucléaires \vec{I}_1 et \vec{I}_2 en \vec{R}_1, \vec{R}_2 , interagissant avec les électrons par une interaction de contact

$$A \sum_{\text{électrons } i} [\delta(\vec{R}_1 - \vec{r}_i) \vec{I}_1 \cdot \vec{S}_i + \delta(\vec{R}_2 - \vec{r}_i) \vec{I}_2 \cdot \vec{S}_i]$$

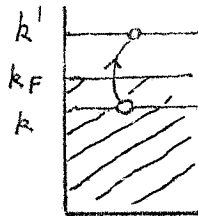
Excitations élémentaires du gaz d'électrons

T-21



Etat fondamental $|0\rangle$

Tous les états k occupés jusqu'au niveau de Fermi k_F



Etat excité $|e\rangle$

Un électron est porté d'un état occupé k vers un état vide k'

Mécanisme de couplage indirect entre les spins nucléaires

L'un des 2 spins excite le gaz d'électrons de $|0\rangle$ à $|e\rangle$, l'autre le fait revenir de $|e\rangle$ à $|0\rangle$

$$H_{\text{eff}} = \sum_e \frac{\langle 0|V|e\rangle \langle e|V|0\rangle}{E_0 - E_e}$$

Expression de H_{eff}

T-22

$$H_{\text{eff}} = A^2 \sum_{\substack{m_s, m'_s = \pm \\ k' \text{ vide}, k \text{ occupé}}} \frac{1}{E_k - E_{k'}} \times \\ \langle k m_s | \delta(\vec{r} - \vec{R}_1) \vec{S} \cdot \vec{I}_1 | k' m'_s \rangle \langle k' m'_s | \delta(\vec{r} - \vec{R}_2) \vec{S} \cdot \vec{I}_2 | k m_s \rangle + 1 \Leftrightarrow 2$$

Expression entièrement calculable car on connaît les énergies et les fonctions d'onde

$$\psi_k(\vec{r}) \sim e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Somme sur les états de spin électroniques

$$\sum_{m_s, m'_s} \langle m_s | \vec{S} \cdot \vec{I}_1 | m'_s \rangle \langle m'_s | \vec{S} \cdot \vec{I}_2 | m_s \rangle \\ = \sum_{m_s} \langle m_s | (\vec{S} \cdot \vec{I}_1) (\vec{S} \cdot \vec{I}_2) | m_s \rangle \\ = \sum_{a,b=1,2,3} I_{1a} I_{2b} \sum_{m_s} \langle m_s | S_a S_b | m_s \rangle \\ = \delta_{ab} \frac{1}{3} \text{Tr } \vec{S}^2 = \frac{1}{2} \delta_{ab} \\ = \frac{1}{2} \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2$$

Interaction scalaire

Intégrale à calculer

$$\int_0^{k_F} d^3k \int_0^\infty \frac{d^3k'}{k_F} \frac{e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)}}{k^2 - k'^2} + c.c.$$

qui fait apparaître $F(2k_F R)$

où $R = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$ et

$$F(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4}$$

Finalement, on obtient

$$H_{eff} = C F(2k_F R) \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2$$

C: constante dépendant de \hbar, m, k_F

Interaction scalaire effective entre les 2 spins nucléaires

- à longue portée
F ne décroît pas exponentiellement mais en $1/R^3$
- présentant des oscillations en fonction de R avec une période de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi.

T-23

T-24 Interprétation physique

III-7

Le spin nucléaire \vec{I}_1 "polarise" le gaz d'électrons. Il interagit différemment avec les spins \vec{S} parallèles ou antiparallèles à lui. La polarisation électronique ainsi créée est proportionnelle à \vec{I}_1 et réagit sur l'autre spin nucléaire \vec{I}_2 .

Cette interaction indirecte est à longue portée car les électrons sont libres. Ils sont délocalisés dans tout le métal et peuvent transmettre l'information sur de grandes distances, de \vec{I}_1 à \vec{I}_2 .

Situation différente dans un isolant. On trouve alors une interaction de portée finie, inversement proportionnelle à la largeur de la bande interdite séparant la bande de conduction de la bande de valence.

Importance des états électroniques très proches de k_F

T-25

Ont un poids élevé à cause de dénominateur d'énergie en $\frac{1}{k^2 - k'^2}$ dans H_{eff}

k et k' peuvent être très proches de part et d'autre de k_F

$$k_F \begin{array}{c} \frac{k'}{k} \\ \hline 1 \\ \hline k \end{array}$$

Il existe des excitations élémentaires du gaz d'électrons d'énergie $k'^2 - k^2$ aussi faible que l'on veut

Conséquences

- Portée infinie
- Oscillations spatiales à la période $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$ dans le couplage indirect

Autre problème très voisin T-26

Ions ayant un paramagnétisme électronique dans un métal (Exemple: métaux du groupe des terres rares - lanthanides)

Interaction indirecte entre 2 ions par l'intermédiaire de l'interaction d'échange de leur couche interne (d ou f), très localisée, avec les électrons de conduction \rightarrow Interaction d'échange (électronique) indirecte entre ions dont le signe dépend de la distance.

Importance pour la compréhension du magnétisme (structures ferro, anti-ferromagnétiques)

28-10-80

Corrections radiatives stimulées et spontanées IV-1

pour une particule chargée sans spin (1^{ère} partie)

Buts de ce cours

- Aborder le problème des corrections radiatives sur le cas, simple mathématiquement, d'une particule sans spin.
- Introduire la méthode de calcul et les idées physiques essentielles et préparer ainsi la discussion ultérieure des effets liés au spin.
- Retrouver par cette méthode tous les résultats établis l'an dernier à partir des équations de Heisenberg.

Plan de ce cours

- ① Hypothèses, notations (T1 à T5).
- ② Hamiltonien effectif de la particule (T6 à T9).
- ③ Effets stimulés et effets spontanés (T10 à T15).
- ④ Forme opératoire de l'hamiltonien effectif (T16 à T18).
- ⑤ Calcul explicite des effets stimulés (T19 à T22).

Hypothèses sur la particule T1

- Charge e , masse m .
- On ignore le spin.
- Particule liée à un centre O par un potentiel électrostatique $e\phi_0(\vec{r})$
- Particule interagissant avec un champ magnétique statique $\vec{B}_0(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_0(\vec{r})$ décrit par un potentiel vecteur $\vec{A}_0(\vec{r})$
- Hamiltonien atomique

$$H_A = \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} + e\phi_0(\vec{r})$$

$$\vec{\pi}_0 = \vec{p} - e\vec{A}_0(\vec{r})$$

$$H_A |i\rangle = E_i |i\rangle$$
- Ordre de grandeur de E_i : E_L (énergie de liaison)
- On ignore toutes les corrections relativistes (spin-orbite, Darwin...)

Quelques commutateurs utiles T2

$$[\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, \phi(\vec{r})] = [\vec{E} \cdot \vec{p}, \phi(\vec{r})] = \frac{\hbar}{i} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \phi(\vec{r})$$

$$[\pi_{0i}, \pi_{0j}] = [p_i - eA_{0i}(\vec{r}), p_j - eA_{0j}(\vec{r})]$$

$$= i e \hbar \underbrace{(\partial_i A_{0j} - \partial_j A_{0i})}_{\sum_k \epsilon_{ijk} (\vec{\nabla} \times \vec{A}_0)_k}$$

$$[\pi_{0i}, \pi_{0j}] = i e \hbar \sum_k \epsilon_{ijk} B_{0k}$$

$$[\vec{a} \cdot \vec{\pi}_0, \vec{b} \cdot \vec{\pi}_0] = i e \hbar (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{B}_0$$

(\vec{a}, \vec{b} : vecteurs classiques)

$$[\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, \pi_0^2] =$$

$$i e \hbar \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} E_i \epsilon_{ijk} (B_{0k} \pi_{0j} + \pi_{0j} B_{0k})$$

Champ de rayonnement

T-3

T-4

Interaction particule - rayonnement

IV-2

Développement du champ en modes

(dans un cube de côté L)

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\epsilon_0 L^3}} i (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})$$

\vec{E} : polarisation \perp à \vec{k} : vecteur d'onde
 $\omega = ck$ pulsation

$a_{\vec{k}\vec{E}}^+$ op. de création d'un photon \vec{k}, \vec{E}
 $a_{\vec{k}\vec{E}}$ " " destruction " " "

Hamiltonien du rayonnement

$$H_R = \sum_{\vec{k}\vec{E}} H_{\omega} \quad H_{\omega} = \hbar \omega (a_{\vec{k}\vec{E}}^+ a_{\vec{k}\vec{E}} + \frac{1}{2})$$

$$H_{\omega} |N\rangle = (N + \frac{1}{2}) \hbar \omega |N\rangle$$

$|N\rangle$: état où le mode \vec{k}, \vec{E} contient N photons

$|0\rangle$: vide de photons

Hamiltonien du système global

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{\Pi}_0 - e\vec{A}(\vec{r})]^2 + e\phi_0(\vec{r}) + H_R$$

$$H = \underbrace{\frac{\vec{\Pi}_0^2}{2m}}_{H_A} + e\phi_0(\vec{r}) + H_R + V$$

$$V = -\frac{e}{m} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\Pi}_0 + \frac{e^2}{2m} (\vec{A}(\vec{r}))^2$$

L'hamiltonien d'interaction V agit à la fois sur les variables de la particule (\vec{r} et \vec{p} apparaissent dans V) et sur les variables du rayonnement ($a_{\vec{k}\vec{E}}$ et $a_{\vec{k}\vec{E}}^+$ apparaissent dans le développement de \vec{A})

Approximation dipolaire électrique

$\vec{A}(\vec{r})$ remplacé par $\vec{A}(\vec{0})$

$$\vec{A}(\vec{0}) = \sum_{\vec{k}\vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} + a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^*)$$

Cohérence avec les approximations précédentes

Interaction particule - mode ω

T-5

Structure de V

(Pour simplifier, on écrit

$$a_{\vec{k}\vec{E}} = a, \quad a_{\vec{k}\vec{E}}^+ = a^+, \quad \mathcal{N} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}}$$

$$V = V^+ a^+ + V^- a$$

$$+ V^{++} (a^+)^2 + V^{--} (a^-)^2 + V^{+-} a^+ a + V^{-+} a a^+$$

1^{ère} ligne: termes à 1 photon

2^{ème} ligne: termes à 2 photons

V^+, V^-, V^{++}, \dots sont des opérateurs relatifs à la particule

$$V^- = -\mathcal{N} \frac{e}{m} \vec{E} \cdot \vec{\Pi}_0 = (V^+)^+$$

$$V^{++} = \frac{e^2 \mathcal{N}^2}{2m} \vec{E}^* \cdot \vec{E}^+ = (V^{--})^+$$

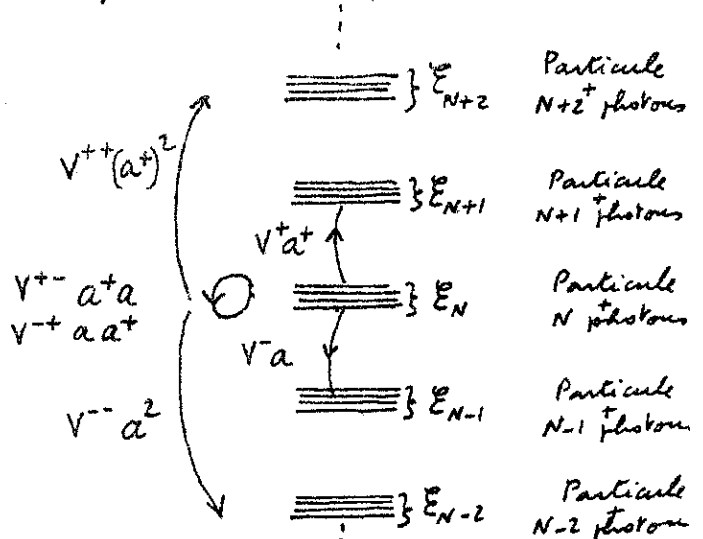
$$V^{+-} = \frac{e^2 \mathcal{N}^2}{2m} \underbrace{\vec{E}^* \cdot \vec{E}}_{=1} = V^{-+} = \frac{e^2}{2m} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}$$

Multiplicités non perturbées

T-6

du système particule - mode ω

Bien séparées (on suppose $\hbar \omega \gg E_L$)



Couplages induits par V

- Nouvelles fréquences de Bohr de la particule (vibration à $\omega, 2\omega, 3\omega, \dots$)
- Modification des énergies dans chaque multiplicité.

Remarque

Même si $\hbar\omega \gg E_L$, il existe toujours un recouvrement des multiplicités

En effet, le spectre de HA est illimité vers le haut

Exemple

- Dégenérescence possible entre état où la particule est dans le continuum en présence de N photons
- état où la particule est dans l'état fondamental en présence de $N+1$ photons

Transitions réelles possibles entre ces 2 états, décrivant une ionisation de l'atome par le rayonnement incident

Néanmoins, si $\hbar\omega \gg E_L$, section efficace d'ionisation négligeable
Autres processus réels possibles : diffusion Thomson, Compton...

T-7

T-8

Hamiltonien effectif Heff

IV-3

Si l'on ne s'intéresse qu'aux modifications du mouvement lent de la particule (modification des propriétés dynamiques), il suffit d'étudier l'effet de V sur E_N

Effet des absorptions et émissions virtuelles de photons par la particule décrit par un hamiltonien effectif n'agissant qu'à l'intérieur de E_N

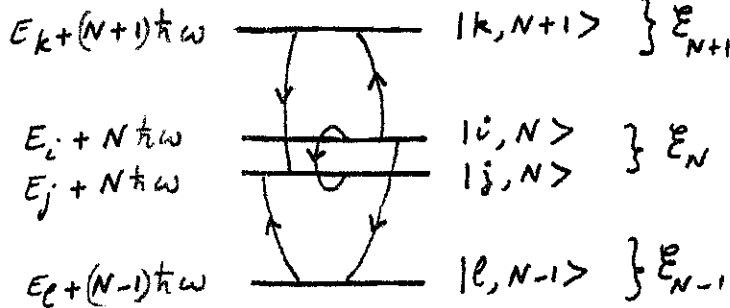
Calcul fait à l'ordre 2 inclus en ϵ

$V^{++}(a^+)^2$ et $V^{--}(a)^2$ sont non diagonaux et déjà d'ordre 2 en ϵ . Ils n'interviendront donc pas

Seuls interviendront $V^{+-}a^+a$ et $V^{-+}aa^+$ à l'ordre 1
 V^+a^+ et V^-a à l'ordre 2

Elements de matrice de Heff

T-9



$$\langle j, N | \text{Heff} | i, N \rangle = \langle j, N | (V^{+-}a^+a + V^{-+}aa^+) | i, N \rangle + \frac{1}{2} \sum_k \langle j, N | V^- a | k, N+1 \rangle \langle k, N+1 | V^+ a^+ | i, N \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_k - \hbar\omega} \right] + \frac{1}{2} \sum_l \langle j, N | V^+ a^+ | l, N-1 \rangle \langle l, N-1 | V^- a | i, N \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_l + \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_l + \hbar\omega} \right]$$

Dépendance en N de Heff

T-10

En utilisant $a|N\rangle = \sqrt{N}|N-1\rangle$
 $a^+|N\rangle = \sqrt{N+1}|N+1\rangle$, on obtient

$$\langle j, N | \text{Heff} | i, N \rangle = (N+1) \langle j | R | i \rangle + N \langle j | S | i \rangle$$

où R et S n'agissent que sur la particule et sont donnés par

$$\langle j | R | i \rangle = \langle j | V^{-+} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_k \langle j | V^- | k \rangle \langle k | V^+ | i \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_k - \hbar\omega} \right]$$

$$\langle j | S | i \rangle = \langle j | V^{+-} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_l \langle j | V^+ | l \rangle \langle l | V^- | i \rangle \times \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_i - E_l + \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_l + \hbar\omega} \right]$$

Enfinement
 $\text{Heff} = (N+1)R + NS = N(R+S) + R$

Effets stimulés

Décrits par les termes de Heff proportionnels à N : $N(R+S)$

Effets produits par l'interaction avec un rayonnement incident, contenu dans le mode ω .

Proportionnels à l'intensité de ce rayonnement.

Effets spontanés

Décrits par les termes de Heff indépendants de N : R

Ces effets sont produits par l'interaction avec le vide de rayonnement.

Dans le vide, la particule interagit avec tous les modes. Au deuxième ordre en e , les effets des divers modes s'ajoutent indépendamment.

Justification du calcul mode par mode.

T-11 T-12

Moyenne du carré du champ

IV-4

Un calcul simple donne

$$\langle N | E^2 | N \rangle = \frac{\hbar \omega}{\epsilon_0 L^3} \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Terme en N : contribution du rayonnement incident $\langle E_{inc}^2 \rangle$

Terme en $\frac{1}{2}$: contribution de fluctuations du vide $\langle E_{vide}^2 \rangle$

Introduction de 2 énergies caractéristiques importantes

$$E_v^N = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m\omega^2} = \frac{e^2 \hbar}{2m\epsilon_0 \omega L^3} N$$

$$E_v^0 = \frac{e^2 \langle E_{vide}^2 \rangle}{2m\omega^2} = \frac{e^2 \hbar}{2m\epsilon_0 \omega L^3} \frac{1}{2}$$

$$E_v^N = 2N E_v^0$$

Interprétation physique de E_v^N et E_v^0

T-13

On verra plus loin que, dans une onde monochromatique classique (fréquence ω , champ efficace E), l'énergie cinétique de vibration d'une particule classique (e, m) vaut

$$E_v^{class} = \frac{e^2 E^2}{2m\omega^2}$$

E_v^N est donc l'énergie cinétique de vibration de la particule due au rayonnement incident

E_v^0 est donc l'énergie cinétique de vibration de la particule due aux fluctuations du vide

Le calcul de Heff au 2^{ème} ordre inclus en e est un calcul au 1^{er} ordre en E_v^N et E_v^0

Etude comparée des effets stimulés et spontanés

T-14

$$Heff = N(R+S) + R$$

On peut réécrire le dernier terme R

$$R = \frac{1}{2}(R+S) + \frac{1}{2}(R-S)$$

Terme $\frac{1}{2}(R+S)$

Même structure que $N(R+S)$, au remplacement près de $\langle E_{inc}^2 \rangle$ par $\langle E_{vide}^2 \rangle$

Même interprétation physique : ce terme représente les effets "stimulés" par les fluctuations du vide

Terme $\frac{1}{2}(R-S)$

Terme nouveau par rapport aux effets stimulés.

A cause de ce terme, les corrections radiatives spontanées ne peuvent être entièrement décrites par une approche type Welton.

Justification de l'approche précédente T-15

qui utilise une description quantique du rayonnement même pour les effets stimulés (pour lesquels une description semi-classique suffirait)

- Le même calcul donne à la fois effets stimulés et spontanés
- La comparaison des termes spontanés avec les termes stimulés permet d'identifier les effets spontanés susceptible d'une interprétation à la Welton et de voir s'il y en a d'autres.
- Autre manière d'obtenir une séparation claire et non ambiguë entre effets des fluctuations du vide et le reste (réaction de rayonnement).
Confirmation par une autre méthode des conclusions du cours 1979-80

T-16) Forme opératoirelle de Heff IV-5

Au lieu d'être définis par leurs éléments de matrice (voir T-10), R et S peuvent être mis sous forme opératoirelle.

Développement en puissances de $E_L/\hbar\omega$ de $\frac{1}{E_i - E_k \pm \hbar\omega}$

$$\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} = -\frac{1}{\hbar\omega} - \frac{E_i - E_k}{\hbar^2\omega^2} - \frac{(E_i - E_k)^2}{\hbar^3\omega^3} + \dots$$

On "remonte" ainsi les énergies électroniques au numérateur

Puis on utilise

$$E_i |i\rangle = H_A |i\rangle \quad E_k |k\rangle = H_A |k\rangle$$

On fait alors apparaître une relation de fermeture sur les états intermédiaires et, par suite, l'élément de matrice entre $|i\rangle$ et $|j\rangle$ d'un produit d'opérateurs.

Exemple de calcul

T-17

$$\frac{1}{2} \sum_k \frac{\langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle}{E_i - E_k - \hbar\omega}$$

Terme en $\frac{1}{\hbar\omega}$

$$-\frac{1}{2\hbar\omega} \sum_k \langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle = -\frac{1}{2\hbar\omega} \langle j|V^-V^+|i\rangle$$

Terme en $\frac{1}{\hbar^2\omega^2}$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \sum_k \langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle (E_i - E_k) \\ & = -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \sum_k \left(\langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+H_A|i\rangle - \langle j|V^-H_A|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle \right) \\ & = -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \langle j|V^-V^+H_A - V^-H_AV^+|i\rangle \\ & = \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \langle j|V^-[H_A, V^+]|i\rangle \end{aligned}$$

Et ainsi de suite ...

Résultat du calcul pour R et S T-18

$$H_{\text{eff}} = (N+1)R + NS$$

$$\begin{aligned} R &= V^- + \\ & - \frac{1}{\hbar\omega} V^-V^+ \\ & + \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} (V^-[H_A, V^+] - [H_A, V^-]V^+) \\ & + \frac{1}{2\hbar^3\omega^3} (V^-[[H_A, V^+], H_A] - [H_A, [H_A, V^-]]V^+) \\ & + \dots \end{aligned}$$

S s'obtient à partir de R

- en échangeant V^+ et V^-
- en remplaçant ω par $-\omega$

R et S sont des opérateurs électroniques.

Calcul de N(R+S)

T-19 T-20

Terme en $\frac{E_V^N}{\hbar\omega} \frac{E_L}{\hbar\omega}$

IV-6

On remplace dans R et S, V^{+-} , V^{-+} , V^+ , V^- par leur expression (voir T-5). On fait apparaître E_V^N (voir T-12). On obtient ainsi

$$H_{\text{eff}}(\text{stimulés}) = N(R+S) = E_V^N + E_V^N \frac{1}{\hbar\omega} \frac{1}{m} [\vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] + E_V^N \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \frac{1}{m} ([\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, [H_A, \vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0]] + \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E}^*) + \dots$$

Ordres de grandeur

- 1^{ère} ligne : E_V^N
- 2^{ème} ligne : $E_V^N \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\pi_0^2}{m} \approx E_V^N \frac{E_L}{\hbar\omega}$
- 3^{ème} ligne : $E_V^N \frac{1}{\hbar^2\omega^2} \frac{\pi_0^2}{2m} H_A \approx E_V^N \frac{E_L^2}{\hbar^2\omega^2}$

On arrête le calcul à cet ordre

On utilise (voir T2)

$$[\vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] = i e \hbar (\vec{E}^* \times \vec{E}) \cdot \vec{B}_0$$

$\vec{E}^* \cdot \vec{E} = 0$ si \vec{E} est réel, c-à-d si l'onde incidente a une polarisation linéaire. Par contre, si \vec{E} est complexe (polarisation circulaire ou elliptique), $\vec{E}^* \times \vec{E} \neq 0$ et a la direction du vecteur d'onde \vec{k}

Le terme en $E_V^N \frac{E_L}{\hbar\omega}$ peut donc se mettre sous la forme

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

avec
$$\vec{\mu} = i \frac{e^3 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^3} \vec{E} \times \vec{E}^*$$

$\vec{\mu}$ apparaît comme un moment magnétique effectif créé par le rayonnement incident

Terme en $\frac{E_V^N}{\hbar^2\omega^2} \frac{E_L^2}{\hbar^2\omega^2}$

T-21

On obtient aisément (voir T-2)

$$\frac{E_V^N}{2m\hbar^2\omega^2} \left([\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, [\frac{\pi_0^2}{2m} + e\phi_0(\vec{r}), \vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0]] + \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E}^* \right) = e \delta\phi_0(\vec{r}) - \frac{e}{2m} (\vec{\delta A}_0(\vec{r}) \cdot \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \cdot \vec{\delta A}_0(\vec{r})) + W_d$$

avec
$$\delta\phi_0(\vec{r}) = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})(\vec{E}^* \cdot \vec{\nabla}) \phi_0(\vec{r})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\delta A}_0(\vec{r}) = \vec{\delta B}_0(\vec{r}) = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})(\vec{E}^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}_0(\vec{r})$$

$$W_d = \frac{e^4 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^3\omega^4} [\vec{B}_0^2 - (\vec{E} \cdot \vec{B}_0)(\vec{E}^* \cdot \vec{B}_0)]$$

Récapitulation du calcul

T-22

sur les effets stimulés

E_V^N : Déplacement en bloc des niveaux. Equivalent à une augmentation de la masse au repos $\delta m = \frac{E_V^N}{c^2}$

$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$: Apparition d'un moment magnétique effectif se couplant à \vec{B}_0

$\left\{ \begin{array}{l} \phi_0 \rightarrow \phi_0 + \delta\phi_0 \\ \vec{B}_0 \rightarrow \vec{B}_0 + \delta\vec{B}_0 \end{array} \right.$ Modification des champs statiques électrique et magnétique "vus" par la particule

(Facteurs de forme électrique et magnétique)

W_d Correction quadratique en de type diamagnétique.

4-11-80

Corrections radiatives stimulées et spontanéespour une particule chargée sans spin (suite et fin)Buts de ce cours

- Poursuivre la discussion du cours précédent.
- Interpréter les corrections radiatives stimulées calculées précédemment. Montrer qu'elles peuvent être comprises classiquement.
- Calculer et interpréter les corrections radiatives spontanées.

Suite du plan

- ⑥ Analyse classique du mouvement d'une particule chargée dans une onde haute fréquence (T1 à T6)
- ⑦ Interprétation physique des corrections radiatives stimulées (T7 à T11)
- ⑧ Corrections radiatives spontanées (T12 à T22)

Onde classique monochromatique T-1

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{i\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \left(\vec{E} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} - \vec{E}^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \right)$$

$$\vec{E} \cdot \vec{E}^* = \vec{E}^* \cdot \vec{E} = 1$$

Moyenne de \vec{E}^2 sur une période

$$\overline{\vec{E}^2(\vec{r}, t)} = \frac{\mathcal{E}^2}{2} (\vec{E} \cdot \vec{E}^* + \vec{E}^* \cdot \vec{E}) = \mathcal{E}^2$$

 \mathcal{E} est le champ efficace

Pour étudier le mouvement de vibration de la particule dans l'onde incidente,

- on néglige la force $e\vec{v} \times \vec{B}$ due au champ magnétique oscillant de l'onde (corrections en v/c)
- on remplace $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ par 1

$$\vec{E}(t) = \frac{i\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\omega t} \vec{E} - e^{i\omega t} \vec{E}^* \right)$$

Etude du mouvement de vibration T-2
en l'absence de champs statiques ($E_0 = B_0 = 0$) \vec{p} : dérivée de la particule de sa position moyenne $\vec{v} = \frac{d}{dt} \vec{p}$: vitesseIntégration de $m \frac{d^2 \vec{p}}{dt^2} = e \vec{E}$

$$\begin{cases} \vec{v} = -\frac{e\mathcal{E}}{m\omega\sqrt{2}} (e^{-i\omega t} \vec{E} + e^{i\omega t} \vec{E}^*) \\ \vec{p} = -\frac{ie\mathcal{E}}{m\omega^2\sqrt{2}} (e^{-i\omega t} \vec{E} - e^{i\omega t} \vec{E}^*) \end{cases}$$

 \vec{p} vibre en phase avec \vec{E}

$$\overline{\vec{v}} = \overline{\vec{p}} = 0$$

Moyenne du carré du déplacement

$$\overline{p^2} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m^2 \omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{E}^* + \vec{E}^* \cdot \vec{E}) = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m^2 \omega^4}$$

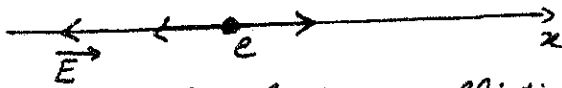
Énergie cinétique moyenne de vibration

$$\mathcal{E}_v = \frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

Polarisation linéaire

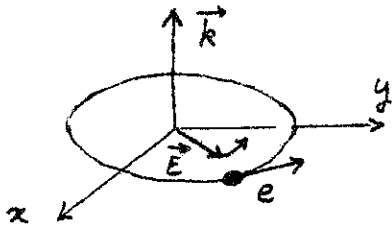
\vec{E} réel, par exemple $\vec{E} = \vec{E}_x$

Mouvement de vibration rectiligne parallèle à \vec{E}



Polarisation circulaire ou elliptique

\vec{E} complexe
par exemple
 $\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{E}_x + i\vec{E}_y)$



Mouvement circulaire uniforme de la particule dans un plan perpendiculaire au vecteur d'onde \vec{k}

Boucle de courant possédant un moment magnétique (qui sera calculé plus loin).

Corrections au mouvement de vibration dues à la présence des champs statiques

T-5

$$\delta \vec{v}(t) = -i \frac{e^2 \vec{E}}{m^2 \omega^2 \sqrt{2}} \times (\vec{E} \times \vec{B}_0 e^{-i\omega t} - \vec{E}^* \times \vec{B}_0 e^{i\omega t})$$

$$\delta \vec{p}(t) = \frac{e^2 \vec{E}}{m^2 \omega^3 \sqrt{2}} \times (\vec{E} \times \vec{B}_0 e^{-i\omega t} + \vec{E}^* \times \vec{B}_0 e^{i\omega t})$$

Si la polarisation \vec{E} n'est pas parallèle à \vec{B}_0 , le mouvement est modifié

Polarisation linéaire

Le mouvement, initialement rectiligne, devient légèrement elliptique

Polarisation circulaire

- Modification du rayon du cercle parcouru dans le plan \perp à \vec{k}
- Apparition d'un mouvement de vibration le long de \vec{k}

T-3 T-4] Effet des champs statiques V-2

\vec{E}_0 et \vec{B}_0 sur le mouvement de vibration

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = e [\vec{E}(t) + \vec{E}_0] + e \vec{v}(t) \times \vec{B}_0$$

La force $e\vec{E}_0$ est statique et modifie très peu le mouvement de vibration

Par contre, comme la vitesse $\vec{v}(t)$ est modulée, la force magnétique $e\vec{v}(t) \times \vec{B}_0$ est elle aussi modulée. Elle peut donc perturber la vibration.

Il suffit donc d'écrire

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = e \vec{E}(t) + e \vec{v}(t) \times \vec{B}_0$$

Pour obtenir l'effet de \vec{B}_0 au 1^{er} ordre en B_0 , on remplace, dans $e\vec{v}(t) \times \vec{B}_0$, $\vec{v}(t)$ par la solution obtenue en l'absence de \vec{B}_0 .

Calcul du moment magnétique de la boucle de courant associé au mouvement de vibration

T-6

$$\vec{\mu}(\vec{B}_0) = \frac{e}{2m} (\vec{p}(t) + \delta \vec{p}(t)) \times (\vec{v}(t) + \delta \vec{v}(t))$$

On tient compte de l'effet de \vec{B}_0 sur le mouvement de vibration

$$\vec{\mu}(\vec{B}_0) = i \vec{E} \times \vec{E}^* \frac{e^3 \vec{E}^2}{2m^2 \omega^3} +$$

$$\frac{e^4 \vec{E}^2}{2m^3 \omega^4} [(\vec{E} \cdot \vec{B}_0) \vec{E}^* + (\vec{E}^* \cdot \vec{B}_0) \vec{E} - 2 \vec{B}_0]$$

1^{ère} ligne

Moment magnétique en l'absence de \vec{B}_0 . N'existe que pour une polarisation circulaire ou elliptique.

Si: $\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{E}_x + i\vec{E}_y)$ $i \vec{E} \times \vec{E}^* = \vec{E}_z$

2^{ème} ligne

Correction due à la présence de \vec{B}_0 . Fait apparaître un moment magnétique même pour une polarisation linéaire.

Interprétation physique des corrections radiatives stimulées

T-7

Terme $E_V^N = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m\omega^2}$

Représente l'énergie cinétique de vibration de la particule dans le rayonnement incident

Déplacement en bloc de tous les niveaux qui peut être interprété comme dû à une augmentation de la masse effective $\delta m c^2 = E_V^N$

Cas où l'intensité du rayonnement incident n'est pas homogène spatialement

E_V^N dépend de \vec{r} ; $E_V^N(\vec{r})$

$E_V^N(\vec{r})$ joue le rôle d'une énergie potentielle.

La particule est repoussée hors des régions de haute intensité

T-9

Termes $\begin{cases} e \delta \phi_0(\vec{r}) \\ -\frac{e}{2} (\delta \vec{A}_0 \cdot \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \cdot \delta \vec{A}_0) \end{cases}$

Correspondent au moyennage des champs statiques \vec{E}_0 et \vec{B}_0 sur l'étendue du mouvement de vibration. Ainsi, l'énergie potentielle électrostatique instantanée s'écrit:

$e \phi_0(\vec{r} + \vec{\rho})$ où $\begin{cases} \vec{r}: \text{position moyenne} \\ \vec{\rho}: \text{vibration} \end{cases}$

$$e \phi_0(\vec{r} + \vec{\rho}) = e \phi_0(\vec{r}) + e(\vec{\rho} \cdot \vec{\nabla}) \phi_0(\vec{r}) + \frac{e}{2} (\vec{\rho} \cdot \vec{\nabla})(\vec{\rho} \cdot \vec{\nabla}) \phi_0(\vec{r}) + \dots$$

En utilisant $\vec{\rho} = 0$

$$\overline{\vec{\rho}^2} = \frac{e^2 E^2}{2m^2 \omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{E}^* + \vec{E}^* \cdot \vec{E})$$

on retrouve bien

$$e \overline{\phi_0(\vec{r} + \vec{\rho})} = e \phi_0(\vec{r}) + e \delta \phi_0(\vec{r})$$

avec $\delta \phi_0(\vec{r}) = \frac{e^2 E^2}{2m^2 \omega^4} (\vec{E}^* \cdot \vec{\nabla})(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \phi_0(\vec{r})$

Même calcul pour $\delta \vec{A}_0(\vec{r})$

T-8

Essai de mise en évidence expérimentale du déplacement E_V^N

V-3

Niveaux de Rydberg faiblement liés et pour lesquels l'approximation haute fréquence $\hbar\omega \gg E_L$ peut être bien remplie

Irradiation laser intense de la transition 5s-58p de Rb

(S. Liberman, J. Pinard Phys. Rev. A 20, 507 (1979))

Pour une évaluation précise de l'ordre de grandeur des corrections radiatives stimulées des états de Rydberg, voir

C. Fabre thèse d'état Paris 1980 chapitre II

T-10

Terme

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 + W_d$$

Peut être réécrit sous la forme

$$-\int_0^1 \vec{\mu}(\lambda \vec{B}_0) \cdot \vec{B}_0 d\lambda$$

Représente l'énergie d'interaction avec le champ statique \vec{B}_0 du moment magnétique, $\vec{\mu}(\vec{B}_0)$, de la boucle de courant associé au mouvement de vibration de la particule

En particulier, W_d représente la contribution du moment magnétique "induit" par la présence de \vec{B}_0 . Correction de type "diamagnétique".

Conclusion pour les

[T-11]

T-12)

Effets spontanés

[V-4]

corrections radiatives stimulées

Toutes les corrections radiatives stimulées peuvent être comprises classiquement. On considère le mouvement de vibration de la particule chargée dans le rayonnement incident, mouvement éventuellement corrigé par la réponse des champs statiques, et on moyenne les diverses énergies qui apparaissent sur une période $\frac{2\pi}{\omega}$

Description des effets en termes de correction de masse effective, de facteurs de forme électrique et magnétique, de moment magnétique effectif.

$$H_{eff}(\text{spontanés}) = \underbrace{\frac{1}{2}(R+S)}_{H_{fe}} + \underbrace{\frac{1}{2}(R-S)}_{H_r}$$

[H_{fe}] Identique à H_{eff}(stimulés) au remplacement près de E_v^0 par E_v^0 .
Même interprétation physique

On sommerait ensuite sur les modes. On peut prendre \vec{E} réel ($\rightarrow \vec{E} \times \vec{E}^* = 0$), ce qui fait disparaître le terme en $i \vec{E} \times \vec{E}^*$

$$H_{fe} = E_v^0 + e \delta \phi_0(\vec{r}) - \frac{e}{2m} [\delta \vec{A}_0(\vec{r}) \cdot \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \cdot \delta \vec{A}_0(\vec{r})] + W_d$$

avec
$$E_v^0 = \frac{e^2 \hbar}{2m \epsilon_0 \omega L^3} \frac{1}{2}$$

$$\delta \phi_0(\vec{r}) = \frac{E_v^0}{m \omega^2} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})^2 \phi_0(\vec{r})$$

$$\vec{\nabla} \times \delta \vec{A}_0(\vec{r}) = \frac{E_v^0}{m \omega^2} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})^2 \vec{A}_0(\vec{r})$$

$$W_d = \frac{E_v^0 e^2}{m^2 \omega^2} [\vec{B}_0^2 - (\vec{E} \cdot \vec{B}_0)^2]$$

Terme nouveau

[T-13]

$$H_r = \frac{1}{2}(R-S)$$

$$R = E_v^0 - \frac{E_v^0}{\hbar \omega} \frac{2}{m} (\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0) (\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)$$

$$- \frac{E_v^0}{\hbar^2 \omega^2} \frac{1}{m} \left((\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0) [H_A, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] - [H_A, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] (\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0) \right) + \dots$$

S obtenu à partir de R en changeant ω en $-\omega$. D'où

$$H_r = \frac{1}{2}(R-S) = - \frac{E_v^0}{\hbar \omega} \frac{2}{m} (\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)^2$$

Moyenne angulaire

Effet de la "couronne" de modes de fréquence ω obtenue par moyenne angulaire

$$\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \sum_{\vec{E} \perp \vec{k}} \iint d\Omega_k$$

Moyenne angulaire

[T-14]

Formules utiles pour le calcul

$$\sum_{\vec{E} \perp \vec{k}} E_i E_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$$

$$\int d\Omega_k \frac{k_i k_j}{k^2} = \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

Résultat du calcul

$$\langle H_{fe}(\omega) \rangle_{ang} = E_v^0 + e \frac{E_v^0}{3m\omega^2} \Delta \phi_0(\vec{r})$$

$$- \frac{e}{2m} (\delta \vec{A}_0 \cdot \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \cdot \delta \vec{A}_0) + \frac{2 E_v^0}{3m^2 \omega^2} e^2 \vec{B}_0^2$$

avec
$$\vec{\nabla} \times \delta \vec{A}_0 = \frac{E_v^0}{3m\omega^2} \Delta \vec{B}_0(\vec{r})$$

$$\langle H_r(\omega) \rangle_{ang} = - \frac{4}{3} \frac{E_v^0}{\hbar \omega} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$$

Intégration sur ω

T-15

T-16

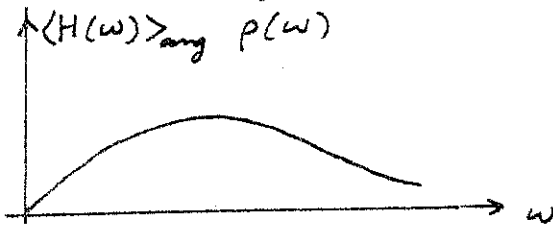
Borne inférieure ω_m

V-5

- Nombre de modes de fréquence comprise entre ω et $\omega + d\omega$

$$p(\omega)d\omega = 2 \times 4\pi \times \frac{k^2 dk}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega$$

- Les corrections radiatives spontanées s'obtiennent en pondérant l'effet de la "couronne de modes" ω par $p(\omega)$ et en intégrant sur ω



Courbe donnant la dépendance en ω des corrections radiatives (ω : fréquence du photon émis et réabsorbé virtuellement)

En principe, les calculs précédents ne sont valables que si $\hbar\omega \gg E_L$ (multiplicités bien séparées).

Il faut donc prendre une borne inférieure ω_m telle que $\hbar\omega_m \gg E_L$ et évaluer la contribution des modes $0 \leq \omega \leq \omega_m$ par une méthode directe, autre que celle de l'hamiltonien effectif.

Très souvent, la contribution des modes $0 \leq \omega \leq \omega_m$ est négligeable, et on peut en plus prendre $\omega_m = 0$ sans commettre d'erreurs importantes.

Borne supérieure ω_M

T-17

Les calculs précédents ne tiennent compte d'aucun effet relativiste (en plus, approximation dipolaire électrique). Ne sont donc valables que si $\hbar\omega \ll mc^2$.

Il faut donc limiter l'intégration par une borne supérieure ω_M telle que $\hbar\omega_M \ll mc^2$. La théorie présentée ici ne sert que donner la contribution aux corrections radiatives des modes $\omega_m \leq \omega \leq \omega_M$

Contribution des modes $\omega > \omega_M$

Il faut tenir compte des effets relativistes, des créations de paires.

Possibilité de généraliser la méthode de l'hamiltonien effectif.

Résultats de l'intégration sur ω

T-18

On pose $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c} = \frac{1}{137}$

Contribution de H_{ff}

(On suppose $B_0 = 0$)

- Énergie cinétique de vibration

$$\frac{\alpha}{\pi} \frac{\hbar^2 (\omega_M^2 - \omega_m^2)}{2mc^2} \approx \frac{\alpha}{\pi} \frac{\hbar^2 \omega_M^2}{2mc^2} = \delta m_{fv} c^2$$

- Moyennage spatial du potentiel

$$\frac{\alpha}{3\pi} \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \log \frac{\omega_M}{\omega_m} e \Delta \phi_0(\vec{r})$$

En ce qui concerne l'effet des fluctuations du vide, on obtient des résultats en accord quantitatif avec ceux des cours 1979-80

Voir T-14 page XI-4

T-16 page XI-5

Contribution de H_r

Correction à l'énergie cinétique de la forme $-\frac{\delta m_r}{m} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$

avec $\delta m_r = \frac{e^2 \omega_M}{3\pi^2 \epsilon_0 c^3} = \frac{4}{3} \frac{\alpha}{\pi} \frac{\hbar \omega_M}{c^2}$

En regroupant ce terme avec $\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$, on obtient $\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} (1 - \frac{\delta m_r}{m}) \approx \frac{\vec{\pi}_0^2}{2(m + \delta m_r)}$

L'effet du terme $\frac{1}{2}(R-S)$ est donc équivalent à une modification de l'énergie cinétique due à une renormalisation de la masse

L'expression obtenue pour δm_r coïncide avec celle obtenue dans le cours 1979-80 et décrivant l'effet de la réaction de rayonnement (T 8 page X1-3)

T-19

T-20

Réaction de rayonnement

V-6

Rappel du calcul classique effectué dans le cours 1979-80
Equation de la dynamique d'une particule interagissant avec le champ de rayonnement

Potentiel externe

Champ de rayonnement libre existant en l'absence de particule

$$(m + \delta m_r) \ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3c^2} \ddot{\vec{r}} + e \vec{E}_0(t)$$

Termes provenant de l'interaction de la particule avec son propre champ de rayonnement, c-à-d le champ qu'elle rayonne à son propre emplacement.

En théorie quantique, le terme en $\ddot{\vec{r}}$ n'intervient que dans les transitions réelles.

Conclusions pour les corrections radiatives spontanées

T-21

A l'ordre 1 en E_V^0 , et 0 en $\frac{1}{c}$, elles se classent en 2 catégories

Effet des fluctuations du vide ($\frac{1}{2}(R+S)$)

- Energie cinétique de vibration de la particule dans les fluctuations du vide
- Modification de l'énergie potentielle due à un moyennage spatial des champs.

Effet de la réaction de rayonnement ($\frac{1}{2}(R-S)$)

- Modification de l'énergie cinétique due à une renormalisation de la masse.

Justification de l'image de Welton pour le Lamb-shift

Remarques

T-22

Le calcul précédent a fait apparaître $\delta m_{fv} c^2$ et $\frac{\delta m_r}{m} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$
Pourquoi ne voit-on pas apparaître $\delta m_r c^2$ et $\frac{\delta m_{fv}}{m} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$?

① $\frac{\delta m_{fv}}{m} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$ est en $\frac{E_V^0}{m c^2} E_L$

et ne peut être obtenu dans un calcul à l'ordre 0 en $\frac{1}{m c^2}$
(E_V^0 , $E_V^0 \frac{E_L}{\hbar \omega}$, $E_V^0 \frac{E_L^2}{\hbar^2 \omega^2}$)

Ce terme sera obtenu plus loin.

② $\delta m_r c^2$ n'apparaît pas car on n'a pas tenu compte dans l'hamiltonien de départ de l'énergie du champ électrostatique propre de la particule.

Etude des corrections relativistes

par la méthode de l'hamiltonien effectif (1^{ère} partie)

But de ce cours

Obtenir, à partir de l'équation de Dirac (en seconde quantification pour tenir compte des effets à plusieurs particules), l'expression d'un hamiltonien effectif à une particule, agissant sur les spins à 2 composantes, incluant les premières corrections relativistes jusqu'à l'ordre 2 inclus en $1/m$ et $1/c$, ainsi que le couplage avec un champ de rayonnement quantifié, et tenant compte des créations virtuelles de paires e^+e^- . Problème très important pour justifier l'existence des hamiltoniens utilisés en physique de basse énergie.

Plan de ce cours

A - L'équation de Dirac

1. Introduction simple de cette équation T1 à T7
2. La difficulté des états d'énergie négative. La théorie des trous. (T8 à T10)
3. Seconde quantification de l'équation de Dirac. Théorie à N particules T11 à T13

B - Limite faiblement relativiste. Comment introduire un hamiltonien effectif?

1. Idée générale T14 à T15
2. Théorie à 1 particule T16 à T18
3. Théorie à N particules. T19 à T22

Equation de Schrödinger T-1

Relation E, \vec{p} pour une particule libre

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Règles de correspondance

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$

$$\hookrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

Courant et densité de probabilité

$$\begin{cases} \rho = \psi^* \psi \geq 0 \\ \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi] \end{cases}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Conservation de la probabilité

Particule en présence d'un champ électromagnétique

Potentils (A, ϕ)

$$E \rightarrow E - e\phi \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A} \right)^2 \psi + e\phi \psi$$

Relation E, \vec{p} pour une particule relativiste T-2

$$\frac{E}{c} = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} \quad (1)$$

- Difficultés pour définir l'opérateur

$$\sqrt{m^2 c^2 - \hbar^2 \Delta}$$

- Disymétries entre les rôles joués par $\frac{\partial}{\partial t}$ et $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$

Si l'on part, non pas de (1), mais de

$$\frac{E^2}{c^2} = \vec{p}^2 + m^2 c^2 \quad (2)$$

on obtient une équation du 2^{ème} ordre en $\frac{\partial}{\partial t}$ et non du 1^{er}.
(Equation de Klein-Gordon)

Equation de Dirac

T-3 T-4

Conditions pour que (3) redonne (1) VI-2

Idee générale

- Partir d'une relation linéaire à la fois en E et en \vec{p} .

(i) On veut avoir $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ et non $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$

(ii) x, y, z, t jouent des rôles symétriques en relativité.

- Cette relation doit être compatible avec

$$\frac{E^2}{c^2} = \vec{p}^2 + m^2 c^2 \quad (1)$$

En l'élevant au carré, on doit obtenir (1)

Réalisation

- Relation linéaire $\{E, \vec{p}\}$ la plus générale

$$E = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2 \quad (2)$$

$\vec{\alpha}, \beta$: quantités réelles sans dimensions

- Elevons (2) au carré

$$E^2 = c^2 \sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j p_i p_j + m c^3 \sum_i (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + \beta^2 m^2 c^4 \quad (3)$$

p_i et p_j commutent toujours. On peut donc récrire la 1^{ère} ligne de (3)

$$c^2 \sum_i \sum_j \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} p_i p_j$$

En identifiant (3) et (1), on obtient

$$\begin{cases} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2 \delta_{ij} \\ \beta \alpha_i + \alpha_i \beta = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad (4)$$

Impossibilité de satisfaire à (4) en prenant des nombres pour $\vec{\alpha}$ et β
 $\vec{\alpha}$ et β sont nécessairement des matrices (hermitique)

ψ est donc nécessairement une fonction d'ondes à plusieurs composante (spinéur). La particule a à la fois

- des degrés de liberté externes ($\vec{r}, \vec{p}, \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \dots$)

- des degrés de liberté internes sur lesquels agissent $\vec{\alpha}$ et β .

Les matrices de Dirac

T-5

On trouve que α_i et β doivent être au minimum des matrices 4×4 pour que les conditions (4) soient réalisées

Réalisation de dimension 4

Rappelons tout d'abord l'expression des matrices 2×2 de Pauli

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On vérifie alors aisément que les relations (4) sont satisfaites si l'on prend

$$(\alpha_i) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (\beta) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

En effet,

$$(\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = \begin{pmatrix} \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i \end{pmatrix} = 2 \delta_{ij}$$

$$\text{car } \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}$$

On vérifie de même aisément que

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad \beta^2 = 1$$

Courant et densité de probabilité

T-6

$$\rho = \psi^+ \psi \quad \vec{j} = c \psi^+ \vec{\alpha} \psi$$

On a bien

$$\begin{cases} \rho \geq 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \end{cases}$$

Hamiltonien de Dirac \mathcal{H}_D

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \mathcal{H}_D \psi$$

Particule libre

$$\mathcal{H}_D = \beta m c^2 + c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$$

$$\text{avec } \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Particule dans un champ électromagnétique

Potentiel \vec{A}, ϕ

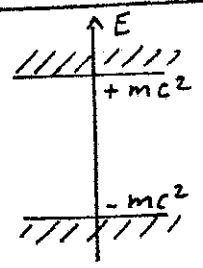
$$\mathcal{H}_D = \beta m c^2 + c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} + c \phi$$

$$\text{avec } \vec{\pi} = \vec{p} - e \vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e \vec{A}$$

\vec{p} et \vec{j} gardent la même forme en présence de \vec{A}, ϕ

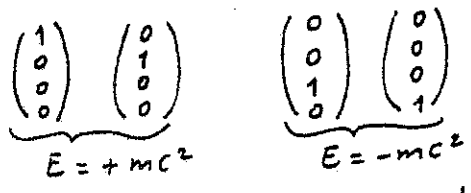
Spectre de \mathcal{H}_D pour une particule libre [T-7]

\vec{p} et \mathcal{H}_D commutent
On trouve aisément
le spectre suivant
2 continuums
 $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}$



Forme des états propres pour une particule au repos : $\vec{p} = 0$

On a alors $\mathcal{H}_D = \beta mc^2$
4 états propres très simples

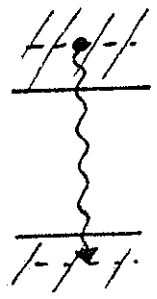


Une particule au repos, d'énergie $+mc^2$, peut exciter dans 2 états internes différents (spins $1/2$)
Résultat qui demeure valable pour $\vec{p} \neq 0$ (par transformations de Lorentz)
Pour $\vec{p} \neq 0$, les 4 composantes sont en général $\neq 0$.

Difficulté des états d'énergie < 0 [VI-3]

Spectre d'énergies négatives s'étendant jusqu'à $-\infty$!
1^{ère} attitude possible

- On considère les états d'énergie < 0 comme des solutions mathématiques parasites. Les seuls états physiques acceptables sont les états d'énergie > 0
- Objection grave : Le couplage avec un champ de rayonnement quantique, a des éléments non-diagonaux entre états d'énergie > 0 et < 0 .
Un électron dans un état d'énergie > 0 peut émettre spontanément un photon et "tomber" dans un état d'énergie < 0



Instabilité des états d'énergie > 0 vis à vis de l'émission spontanée !

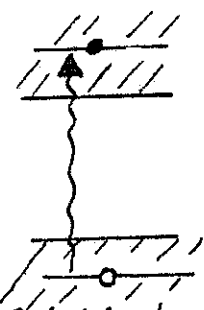
2^{ème} attitude : Idée de Dirac [T-9]

- Tous les états d'énergie < 0 sont remplis. Comme les électrons sont des fermions (spins $1/2$), le principe de Pauli interdit à un électron d'énergie > 0 de tomber dans un état d'énergie < 0 déjà occupé.
Suppression de la difficulté précédente.

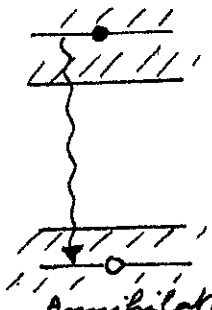
Prediction nouvelle suggérée par l'idée précédente :
L'absence d'un électron d'énergie $E < 0$, de charge e , d'impulsion \vec{p} de spin μ est équivalente à la présence d'une particule d'énergie $-E > 0$, de charge $-e$, d'impulsion $-\vec{p}$, de spin $-\mu$.

Prediction du positron, anti-particule de l'électron
Un positron apparaît comme un "trou" dans le continuum des états d'énergie < 0 .

Autres prédictions intéressantes. [T-10]



Création de paires e^+e^- par absorption d'un photon



Annihilation d'une paire e^+e^- par émission d'un photon

Conclusion

L'équation de Dirac ne peut être conservée dans le cadre des théories à 1 particule.
Elle ne peut être interprétée de manière satisfaisante que dans le cadre des théories à un nombre indéterminé de particules. (Théorie quantique des champs)

Seconde quantification de l'équation de Dirac T11

$u_{\vec{k}}$: Fonction propre commune à \vec{p} et \mathcal{H}_D
 de valeurs propres $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, $E_p = +\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$

$v_{\vec{k}}$: " " " " $-\vec{p} = -\hbar \vec{k}$, $-E_p = -\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$

Développement de la fonction d'onde la plus générale Ψ sur la base des états propres de \mathcal{H}_D

$$\Psi = \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^- v_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Ψ est la fonction d'onde la plus générale de la théorie à une particule.

On quantifie Ψ en remplaçant les coefficients du développement $\alpha_{\vec{k}}$ $\alpha_{\vec{k}}^-$ par des opérateurs d'annihilation d'un électron dans l'état correspondant

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^- v_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Champ quantique de Dirac
 Relations d'anticommutation pour les c et c^+ (fermions)

Reinterprétation de $c_{\vec{k}}^-$ et $c_{\vec{k}}^+$ VI-4

On pose $c_{\vec{k}}^- = b_{\vec{k}}^+$ $c_{\vec{k}}^+ = b_{\vec{k}}$

Détruire un électron $-\vec{p}$, $-E_p$ revient à créer un positron $+\vec{p}$, $+E_p$

Créer un électron $-\vec{p}$, $-E_p$ revient à détruire un positron $+\vec{p}$, $+E_p$

b et b^+ sont donc des opérateurs d'annihilation et de création d'un positron

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} (c_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) + b_{\vec{k}}^+ v_{\vec{k}}(\vec{r}))$$

Relations d'anticommutation

$$[c_i, c_j]_+ = [c_i^+, c_j^+] = 0$$

$$[c_i, c_j^+]_+ = \delta_{ij}$$

on déduit

$$[c_k, c_{k'}]_+ = [c_k^+, c_{k'}^+]_+ = [b_k, b_{k'}]_+ = [b_k^+, b_{k'}^+]_+ = 0$$

$$[c_k, b_{k'}^+]_+ = [c_k^+, b_{k'}]_+ = 0$$

$$[c_k, c_{k'}^+]_+ = \delta_{kk'} \quad [b_k, b_{k'}^+]_+ = \delta_{kk'}$$

Hamiltonien de Dirac en seconde quantification T-13

A l'Hamiltonien \mathcal{H}_D de la théorie à une particule, on associe l'Hamiltonien suivant en seconde quantification

$$H_D = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \mathcal{H}_D \Psi(\vec{r}) =$$

$$\sum_{\vec{k}} \underbrace{\langle u_{\vec{k}} | \mathcal{H}_D | u_{\vec{k}} \rangle}_{E_k} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \underbrace{\langle v_{\vec{k}} | \mathcal{H}_D | v_{\vec{k}} \rangle}_{-E_k} c_{\vec{k}}^- c_{\vec{k}}^+$$

$$= \sum_{\vec{k}} (E_k c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} - E_k b_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+)$$

$$\text{Or } b_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ = 1 - b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

Donc

$$H_D = E_0 + \sum_{\vec{k}} E_k N_{\vec{k}}^e + \sum_{\vec{k}} E_k N_{\vec{k}}^p$$

avec $N_{\vec{k}}^e = c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}$ nombre d'électrons d'énergie E_k

$N_{\vec{k}}^p = b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$ " de positrons " " "

$E_0 = \sum_{\vec{k}} (-E_k)$: énergie du vide (inobservable)

Seules sont observables les déviations par rapport au vide

limite faiblement relativiste T-14

La seule théorie valable est bien sur la théorie à N particules. Il existe cependant des situations

- vitesses faibles devant c
- Interactions avec des champs variant suffisamment lentement dans le temps et dans l'espace

pour lesquelles les états correspondants à un électron forment une multiplicité bien isolée des autres. Les créations de paires $e^+ e^-$ sont alors virtuelles et non réelle.

Peut-on tenir compte de ces créations virtuelles de paire pour introduire un hamiltonien effectif agissant dans le sous-espace des états à 1 particule?

Idee générale suivie

[T-15]

T-16]

Théorie à 1 particule

[VI-5

1 - Prendre pour hamiltonien non-perturbé
 $H_0 = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \beta mc^2 \Psi(\vec{r})$ Théorie à N particules

On verra que le spectre de H_0 est formé de multiplicités bien séparées correspondant chacune à des nombres bien définis d'électrons et de positrons.

2 - Considérer le reste de l'hamiltonien V comme une perturbation comptant entre elles les multiplicités propres de H_0

3 - Traiter l'effet de cette perturbation dans la multiplicité à un électron par la méthode de l'hamiltonien effectif.

Auparavant, on appliquera une méthode analogue à l'hamiltonien de Dirac à 1 particule. On prendra

$$H_0 = \beta mc^2$$

H_0 a 2 multiplicités propres E_{\pm} d'énergie $\pm mc^2$. On étudiera l'effet des transitions virtuelles induites par V entre E_+ et E_- par la méthode de l'hamiltonien effectif.

Multiplicités propres de $H_0 = \beta mc^2$

2 multiplicités E_+ et E_- infiniment dégénérées séparées de $2mc^2$

$$\begin{array}{l} +mc^2 \quad E_+ \\ -mc^2 \quad E_- \end{array}$$

E_+ est sous tendue par des spineurs ayant seulement 2 composantes non nulles (la 1^{ère} et la 2^{ème}) car

$$H_0 = \beta mc^2 = mc^2 \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

L'hamiltonien effectif décrivant l'effet de $V = H_D - H_0$ dans E_+ agira donc sur des spineurs à 2 composantes.

Raccord avec la mécanique quantique non relativiste habituelle

Attention. Cet hamiltonien effectif donne de bonnes approximations pour les énergies (valeurs propres) mais non pour les états propres (ce à l'annulation de E_+ par E_-)

Opérateurs "diagonaux" et "non diagonaux" [T-17]

- Un opérateur "diagonal" n'a d'éléments de matrice non nuls qu'à l'intérieur de E_+ ou E_- .

Exemple: β

- Un opérateur "non diagonal" n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre E_+ et E_- .

$$(\alpha_i) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

Exemple: $\vec{\alpha}$

- H_D contenant à la fois $\vec{\alpha}$ et β est à la fois diagonal et non diagonal. La méthode de l'hamiltonien effectif consiste à faire subir à H_D une transformation unitaire qui le rende diagonal.

Méthode de Foldy-Wouthuysen

$$e^{iS} H_D e^{-iS}$$

Suite de transformations unitaires imbriquées

Méthode utilisée ici

$$e^{iS} H_D e^{-iS} \text{ avec } S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots$$

Développement de S

Expression de la "perturbation" V [T-18]

On tient compte de l'interaction de la particule avec

- un champ statique extérieur \vec{A}_0, ϕ_0
- le champ de rayonnement \vec{A}, ϕ quantifié

En jauge de Coulomb $\phi = 0$

$$H_D = H_0 + c \vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t + e \phi_0 + H_R + V_{\text{Coulomb}}$$

$$\vec{\Pi}_t = \underbrace{\vec{p} - e \vec{A}_0(\vec{r})}_{\vec{\Pi}_0} - e \vec{A}(\vec{r})$$

$$H_R = \sum_{kE} \hbar \omega (a_{kE}^\dagger a_{kE} + \frac{1}{2}) \quad \text{Energie des photons}$$

V_{Coulomb} = Energie du champ électrostatique de la particule (sans conséquence dynamique)

Parties paire (W) et impaire (U) de V

$$U = c \vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t$$

$$W = e \phi_0(\vec{r}) + H_R + V_{\text{Coulomb}}$$

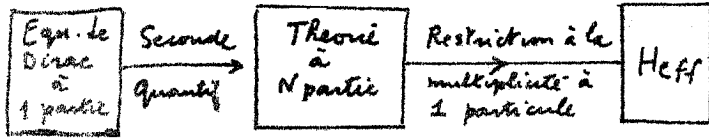
Théorie à N particules

T-19

Indispensable

car on tient compte du couplage avec le rayonnement quantifié. Transitions spontanées se produisant de E_+ vers E_-

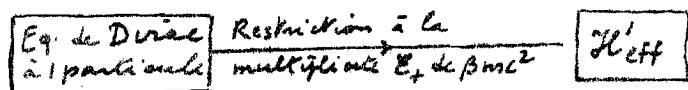
Principe du calcul



Problème : de quel hamiltonien à 1 particule, H_{eff} , agissant sur les spins à 2 composants, H_{eff} peut-il être considéré comme l'opérateur associé en seconde quantification ?

$$H_{eff} = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) H_{eff} \Psi(\vec{r})$$

Attention. H_{eff} n'a aucune raison de coïncider avec H_{eff} obtenu par la méthode de l'hamiltonien effectif appliquée à la théorie de Dirac à 1 particule



C'est H_{eff} qui a un sens physique clair, et non H_{eff}

Multiplicités propres de H_0

T-21

Diagramme à double entrée horizontalement : charge totale ($N_p - N_e$)
verticalement : $mc^2 \times$ nombre total de particules

	<u>$3e^-, 2e^+$</u>	<u>$3e^+, 2e^-$</u>			
$5mc^2$					
$4mc^2$	<u>$3e^-, 1e^+$</u>	<u>$2e^+, 2e^-$</u>	<u>$3e^+, 1e^-$</u>		
$3mc^2$	<u>$2e^-, 1e^+$</u>	<u>$2e^+, 1e^-$</u>			
$2mc^2$	<u>$2e^-$</u>	<u>$1e^+, 1e^-$</u>	<u>$2e^+$</u>		
mc^2	<u>$1e^-$</u>	<u>$1e^+$</u>			
0		<u>vide</u>			
	-2	-1	0	+1	+2
	→ Charge totale				

VI-6

T-20

Expression de H_0 en seconde quantification

Base d'état à 1 particule adaptée à H_0

$u_{0k}(\vec{r})$ spinors propres de $H_0 = \beta mc^2$
valeurs propres $+\hbar k$ pour \vec{p} , $+mc^2$ pour H_0
 $v_{0k}(\vec{r})$ " " $-\hbar k$ pour \vec{p} , $-mc^2$ pour H_0

(Nombres quantiques de spin sous-entendus)

Expression de $\Psi(\vec{r})$ en seconde quantification

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_k (c_{0k} u_{0k}(\vec{r}) + b_{0k}^\dagger v_{0k}(\vec{r}))$$

c_{0k} : op. de destruction d'un e^- ($\hbar k, mc^2$)
 b_{0k}^\dagger : op. de création d'un e^+ ($\hbar k, mc^2$)

Expressions de H_0

$$H_0 = E_0 + mc^2 (N_e + N_p)$$

$$N_e = \sum_k c_{0k}^\dagger c_{0k} : \text{Nombre total de } e^-$$

$$N_p = \sum_k b_{0k}^\dagger b_{0k} : \text{Nombre total de } e^+$$

E_0 : énergie du vide (inobservable)

Exemples de problèmes intéressants

T-22

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $1e^-$

Justification des hamiltoniens à 1 particule utilisés en physique basse énergie (physique atomique et moléculaire, physique du solide...)

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $2e^-$

Modification des interactions entre électrons dues à des créations virtuelles de paires.
En étudiant ensuite l'effet des échanges de photons, interactions électromagnétiques

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $1e^- 1e^+$

Termes nouveaux apparaissant quand une particule interagit avec son antiparticule
"Fou de l'annihilation"
Structure fine du positronium
⋮

Buts de ce cours.

- Pourvoir la discussion des corrections relativistes.
- Calculer explicitement l'hamiltonien effectif décrivant ces corrections en suivant la méthode exposée plus haut.

Plan③ Hamiltonien d'interaction V en seconde quantification

Règles de sélection

Couplages induits par V entre multiplicités propres de H_0
(T1 à T6)④ Expressions de H_{eff} à l'ordre 3 inclus en V

(T7 à T-12)

⑤ Calcul explicite de H_{eff} (T-13)

Ordre 0 et 1 (T-14)

Ordre 2 (T-15 à T-21)

Un intermédiaire de calcul commode pour l'ordre 3
(T22 à T25)Hamiltonien d'interaction V en seconde quantification. T-1

$$V = U + W + W_{\text{Coulomb}}$$

$$U = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) U \Psi(\vec{r})$$

$$W = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) W \Psi(\vec{r})$$

$$\text{avec } U = c \vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_e = c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e \vec{A}_0(\vec{r}) - e \vec{A}(\vec{r}))$$

$$W = e \phi_0(\vec{r}) + \mathcal{H}_R$$

(Voir T3 pour W_{Coulomb})

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_k (a_{0k} u_{0k}(\vec{r}) + b_{0k}^\dagger v_{0k}(\vec{r}))$$

$$\Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_k (a_{0k}^\dagger u_{0k}^\dagger(\vec{r}) + b_{0k} v_{0k}^\dagger(\vec{r}))$$

Expression de U Comme les seuls éléments de matrice de U sont entre u_0 et v_0 , il vient

$$U = \sum_{kk'} (\langle v_{0k'} | U | u_{0k} \rangle b_{0k'}^\dagger a_{0k} + \langle u_{0k} | U | v_{0k'} \rangle a_{0k}^\dagger b_{0k'})$$

 U détruit ou crée une paire e^+, e^- Couplages induits par U T-2Règle de sélection $\Delta n = \pm 2$ U couple donc des multiplicités adjacentes rangées sur une même colonne verticale du tableau T-21 (page VI-6)

Conservation de la charge globale mais non du nombre total de particule

Expression de W Les seuls éléments de matrice non nuls de W sont entre $2u_0$ ou $2v_0$

$$W = \sum_{kk'} (\langle u_{0k'} | W | u_{0k} \rangle a_{0k'}^\dagger a_{0k} + \langle v_{0k'} | W | v_{0k} \rangle b_{0k'}^\dagger b_{0k})$$

 W ne change pas le nombre total de particules. N'agit qu'à l'intérieur de chaque multiplicitéCas particuliers de \mathcal{H}_R \mathcal{H}_R n'agit que sur les photons.

Opérateur unité dans l'espace de Fock des électrons et positrons.

Cas particuliers de $W_{Coulomb}$

[T-3]

Par seconde quantification de $V_{Coulomb}$, on obtient

$$W_{Coulomb} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

avec $\rho(\vec{r}) = \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})$

Energie électrostatique de la distribution de charges

$W_{Coulomb}$ conserve la charge globale mais peut faire varier le nombre total de particules de $\Delta n = 0, \pm 2, \pm 4$

$W_{Coulomb}$ n'est pas diagonal comme l'opérateur $V_{Coulomb}$ dont il est issu

Dans les multiplicités à 2 particules ($1e^+, 1e^-; 2e^+, 2e^-$) la restriction de $W_{Coulomb}$ à ces multiplicités fait apparaître l'interaction de Coulomb instantanée entre les 2 particules

[T-4] Simplifications

[VII-2]

On s'intéresse ici à la multiplicité E, \bar{n} . On ne tiendra pas compte de la différence entre $V_{Coulomb}$ et $W_{Coulomb}$. On ignorera donc tous les effets non-relatifs venant corriger l'énergie du champ électrostatique propre de l'interaction et liés aux positions (créations virtuelles de paires e^+e^-)

Ces effets sont en effet très petits à la limite faiblement relativiste étudiée ici. Pour $\hbar\omega \gg mc^2$, ils sont responsables de plusieurs corrections intéressantes :

- diminution de la divergence de la self-énergie électrostatique
- Divergence linéaire en $k_p \rightarrow$ logarithmique
- Renormalisation de la charge
- Polarisation du vide

Possibilité également d'utiliser la jauge de Lorentz au lieu de la jauge de Coulomb (interactions électrostatiques résultant de l'échange de photons "longitudinaux" et "temporels")

Jusqu'à quel ordre faut-il pousser le calcul ?

[T-5]

Ordre 0 en V $H_0 = mc^2(N_e + N_p)$

- \hookrightarrow ordre "-2" en $1/c$
- ordre "-1" en $1/m$

Ordre 1 en V

Restriction de V à la multiplicité E ,

- \hookrightarrow ordre 0 en $1/c$ et $1/m$

Ordre 2 en V

- 1 dénominateur d'énergie en $\frac{1}{mc^2}$
- 2 numérateurs en c (provenant de $u = c\vec{\alpha}\cdot\vec{\pi}_f$)

- \hookrightarrow ordre 0 en $1/c$, ordre 1 en $1/m$

Ordre 3 en V

- 2 dénominateurs d'énergie : $\frac{1}{m^2c^4}$
 - 3 numérateurs. $u(v_c), u(v_c), W$
- \hookrightarrow ordre 2 en $1/c$, ordre 2 en $1/m$

On se limitera à cet ordre. Voir cependant remarque (T-26) page VII-7.

Une formule utile relative aux matrices α_i de Dirac

[T-6]

A partir de $(\alpha_i) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$ on calcule aisément

$$(\alpha_i\alpha_j - \alpha_j\alpha_i) = \begin{pmatrix} \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i \end{pmatrix}$$

Or, les matrices σ_i de Pauli satisfont à

$$\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

Donc

$$\begin{cases} \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} \\ \alpha_i\alpha_j - \alpha_j\alpha_i = 2i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \end{cases}$$

$$\hookrightarrow \alpha_i\alpha_j = \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

On en déduit que si \vec{A} et \vec{B} sont 2 vecteurs (n'agissant pas sur les degrés de liberté internes) :

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{A})(\vec{\alpha}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$$

Expression de Heff à l'ordre

T-7

T-8

Résultats du calcul

VII-3

3 inclus en V

- Nécessité de pousser ce calcul jusqu'à l'ordre 3 inclus en V pour obtenir Heff à l'ordre 2 inclus en $1/m$ et $1/c$

Retour aux formules générales du cours II (voir T-10 page II-3)

Simplifications importantes

Les multiplicités propres de H_0 sont toutes complètement dégénérées. Une seule énergie non-perturbée E_i pour chaque multiplicité E_i

— E_j P_i : projecteurs sur E_i

— E_i $H_0 P_i = P_i H_0 = E_i P_i$

$$V = \underbrace{\sum_i P_i W P_i}_{\text{Partie "diagonale" de V}} + \underbrace{\sum_i \sum_{j \neq i} P_i U P_j}_{\text{Partie "non-diagonale" de V}}$$

Partie "diagonale" de V Partie "non-diagonale" de V

Ordre 0

$$P_i H_{\text{eff}}^{(0)} P_i = P_i H_0 P_i = E_i P_i$$

Ordre 1

- Expression de $P_i H_{\text{eff}}^{(1)} P_i$

$$P_i H_{\text{eff}}^{(1)} P_i = P_i W P_i$$

- Calcul de S_1 (nécessaire pour l'ordre 2)

$$S_1 = \sum_i \sum_{j \neq i} i \frac{P_i U P_j}{E_j - E_i}$$

Ordre 2

- Expression de $P_i H_{\text{eff}}^{(2)} P_i$

$$P_i H_{\text{eff}}^{(2)} P_i = \sum_{j \neq i} \frac{P_i U P_j U P_i}{E_i - E_j}$$

Ordre 2 (suite)

T-9

- Calcul de S_2 (nécessaire pour l'ordre 3)

$$S_2 = \sum_i \sum_{j \neq i} -i \frac{P_i [U, W] P_j}{(E_j - E_i)^2} + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} \frac{i}{2} \frac{1}{E_j - E_i} P_i U P_k U P_j \times \left(\frac{1}{E_j - E_k} + \frac{1}{E_i - E_k} \right)$$

Ordre 3 : Calcul de $P_i H_{\text{eff}}^{(3)} P_i$

$$P_i H_{\text{eff}}^{(3)} P_i =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{1}{(E_i - E_j)^2} \left\{ P_i [U, W] P_j U P_i - P_i U P_j [U, W] P_i \right\} + \frac{1}{3} \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} P_i U P_j U P_k U P_i \times \left\{ \frac{2}{(E_i - E_k)(E_i - E_j)} + \frac{1}{(E_i - E_j)(E_j - E_k)} + \frac{1}{(E_i - E_k)(E_k - E_j)} \right\}$$

Simplifications supplémentaires pour la théorie à 1 particule

T-10

- H_0 n'a alors que 2 multiplicités propres E_+ et E_-

- les termes $\sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j}$ disparaissent

- le dénominateur $\frac{1}{E_+ - E_-}$ est une constante $\frac{1}{2mc^2}$ ainsi que $\frac{1}{(E_+ - E_-)^2}$

On peut alors faire apparaître des relations de fermeture intermédiaire et obtenir une forme opératoire pour Heff

$$P_+ H_{\text{eff}} P_+ = mc^2 P_+ + P_+ W P_+ + P_+ U_{\text{Coulomb}}$$

$$+ \frac{1}{2mc^2} P_+ U^2 P_+$$

$$- \frac{1}{8m^2 c^4} P_+ [U, [U, W]] P_+$$

Simplifications supplémentaires dans T-11
 la théorie à N particules quand on néglige la différence entre V_{Coulomb} et W_{Coulomb}

- La partie non diagonale, U , de V ne compte alors que des multiplicités adjacentes sur une même verticale du tableau T21 page VI-6 : $\Delta n = \pm 2$

On a alors $\frac{1}{E_i - E_j} = \pm \frac{1}{2mc^2}$

et $\frac{1}{(E_i - E_j)^2} = \frac{1}{4m^2c^4}$

Possibilité de faire apparaître des relations de fermeture intermédiaires et d'obtenir des formes opératorielle

- Avec 3 opérateurs U , on ne peut partir de E_i et revenir à E_i :

$$\underbrace{P_i U P_j}_{\Delta n = \pm 2} \underbrace{U P_k}_{\Delta n = \pm 2} \underbrace{U P_i}_{\Delta n = \pm 2} \rightarrow (\Delta n)_{\text{total}} = \pm 2, \pm 6$$

La dernière ligne de (T-9) ne contribue donc pas.

Expression finale de H_{eff} VII-4

(quand on néglige la différence entre V_{Coulomb} et W_{Coulomb})

$$P_+ H_{\text{eff}} P_+ = mc^2 P_+ + P_+ W P_+ + P_+ V_{\text{Coulomb}} - \frac{1}{2mc^2} P_+ U^2 P_+ - \frac{1}{8m^2c^4} P_+ [U, [U, W]] P_+$$

Noter les analogies et différences avec $P_+ H_{\text{eff}} P_+$ (voir T-10)

Noter en particulier le signe - dans le terme d'ordre 2 : $-\frac{1}{2mc^2} P_+ U^2 P_+$

Calcul explicite de l'hamiltonien effectif T-13

- On va calculer parallèlement $P_+ H_{\text{eff}} P_+$ (Eqn. de Dirac à 1 particule) voir T-10

$P_+ H_{\text{eff}} P_+$ (Eqn. de Dirac à N particules) voir T-12

pour voir à partir de quel ordre, et dans quelles conditions, les 2 expressions diffèrent.

- La discussion physique des termes obtenus aux différents ordres sera ensuite faite dans le cadre de la théorie à N particules (seul, $P_+ H_{\text{eff}} P_+$, a un sens physique clair).

Quand il y a coïncidence entre $P_+ H_{\text{eff}} P_+$ et $P_+ H_{\text{eff}} P_+$, c'est que les transitions virtuelles entre multiplicités propres E_+ et E_- de H_0 sous l'effet de V "simulent" bien les effets à plusieurs particules décrits par $P_+ H_{\text{eff}} P_+$.

Ordre 0 et ordre 1 T-14

Résultat très simple et identique pour les 2 théories

Restriction à E_+ (dans le 1^{er} cas), à E_- (dans le 2^{ème}) de l'hamiltonien à 1 particule:

$$mc^2 + e\phi_0(\vec{r}) + \mathcal{H}_R + V_{\text{Coulomb}}$$

mc^2 : énergie au repos de l'électron

$e\phi_0(\vec{r})$: interaction avec le potentiel électrostatique externe

\mathcal{H}_R : énergie des photons transverse

V_{Coulomb} : énergie du champ électrostatique propre de la particule.

D'après (T-10), il faut calculer

$$\frac{1}{2mc^2} U^2 \text{ avec } U = c \vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t$$

$$\vec{\Pi}_t = \vec{p} - e \vec{A}_t(\vec{r}) \leftarrow \text{Potentiel vecteur total}$$

$$\vec{A}_t(\vec{r}) = \vec{A}_0(\vec{r}) + \vec{A}(\vec{r})$$

Potentiel vecteur
statique appliqué

Potentiel vecteur du
rayonnement quantifié

D'après (T-6)

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t)(\vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t) = \vec{\Pi}_t^2 + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{\Pi}_t \times \vec{\Pi}_t)$$

$$\text{Or } \vec{\Pi}_t \times \vec{\Pi}_t = \underbrace{\vec{p} \times \vec{p}}_{=0} + e^2 \underbrace{\vec{A}_t \times \vec{A}_t}_{=0}$$

$$- e (\vec{p} \times \vec{A}_t + \vec{A}_t \times \vec{p})$$

$$= - \vec{A}_t \times \vec{p} + \frac{\hbar}{i} \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{A}_t}_{\vec{B}_t \text{ champ magnétique total}}$$

Donc

$$\vec{\Pi}_t \times \vec{\Pi}_t = - \frac{e \hbar}{i} \vec{B}_t$$

$$\frac{1}{2mc^2} U^2 = \frac{\vec{\Pi}_t^2}{2m} - \frac{e \hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_t$$

On peut récrire le dernier terme

$$- g \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \cdot \vec{B}_t \text{ avec}$$

$$g = 2$$

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2m}$$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Facteur g

Magneton de Bohr

Spin

Conclusion : A l'ordre 2, et dans la théorie à 1 particule, on voit apparaître :

- l'énergie cinétique $\frac{\vec{\Pi}_t^2}{2m}$

- le spin $\frac{1}{2}$ de l'électron

- le moment magnétique de spin de l'électron, avec le facteur $g = 2$, interagissant avec le champ magnétique total \vec{B}_t (champ statique appliqué \vec{B}_0 + champ magnétique \vec{B} du rayonnement quantifié).

On en déduit que

Il faut partir de l'expression de U en seconde quantification (voir T-1), puis calculer (d'après T-12) $-\frac{1}{2mc^2} P_+ U^2 P_+$

$$-\frac{1}{2mc^2} P_+ U^2 P_+ = -\frac{1}{2mc^2} \sum_k \sum_{k'} \sum_{k''}$$

$$\langle u_{0k} | U | v_{0k'} \rangle \langle v_{0k'} | U | u_{0k''} \rangle$$

$$P_+ b_{0k'} a_{0k''} a_{0k}^\dagger b_{0k'}^\dagger P_+$$

$b_{0k'}$ anticommute avec $a_{0k''}$ et a_{0k}^\dagger ,

donc commute avec $a_{0k''} a_{0k}^\dagger$. On peut donc faire apparaître $b_{0k'} b_{0k'}^\dagger = 1 - b_{0k'}^\dagger b_{0k'}$.

Comme $b_{0k'} P_+ = 0$, il vient finalement

$$P_+ b_{0k'} a_{0k''} a_{0k}^\dagger b_{0k'}^\dagger P_+ = P_+ a_{0k''} a_{0k}^\dagger P_+$$

$$\text{Or } a_{0k''} a_{0k}^\dagger = \delta_{k''k} - a_{0k}^\dagger a_{0k''}$$

Contribution de $\delta_{k''k}$

Déplacement global, Δ , de E_i vers le bas

$$\Delta = -\frac{1}{2mc^2} \sum_k \sum_{k'} \langle u_{0k} | U | v_{0k'} \rangle \langle v_{0k'} | U | u_{0k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \sum_k \langle u_{0k} | U^2 | u_{0k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \sum_{k'} \langle v_{0k'} | U^2 | v_{0k'} \rangle$$

D'après l'expression (T-1) de U , il y a 4 types de termes dans U^2

$$b_{0k''} a_{0k''} b_{0k'} a_{0k}$$

$$a_{0k}^\dagger b_{0k''} b_{0k'} a_{0k}$$

$$b_{0k''} a_{0k''} a_{0k}^\dagger b_{0k'}$$

$$a_{0k}^\dagger b_{0k''} a_{0k}^\dagger b_{0k'}$$

A l'intérieur de E_i (multiplicité $\sim 10^4$), seule, la 3^{ème} ligne a un élément de matrice non nul (à condition en plus que $k'' = k'$: création et destruction d'un positron)

Dans les 2 premières lignes, $b_{0k'}$ détruit un positron qui n'existe pas.

Dans la 4^{ème} ligne, il y a création de 2 positrons et 2 électrons ($\Delta n = 4$)

Contribution de $-a_{0k}^+ a_{0k}$

Notes le signe - qui transforme le signe - de $-\frac{1}{2mc^2} P_i U^2 P_i$ en signe +

$$+\frac{1}{2mc^2} \sum_k \sum_{k''} P_i a_{0k}^+ a_{0k''} P_i \times$$

$$\sum_{k'} \langle u_{0k} | U | v_{0k'} \rangle \langle v_{0k'} | U | u_{0k''} \rangle$$

$$= \langle u_{0k} | U^2 | u_{0k''} \rangle$$

(à cause du caractère non diagonal de U)

On obtient finalement pour la contribution du terme en $-a_{0k}^+ a_{0k}$

$$\sum_k \sum_{k''} P_i a_{0k}^+ a_{0k''} P_i \langle u_{0k} | \frac{U^2}{2mc^2} | u_{0k''} \rangle$$

On reconnaît la restriction à \bar{E}_i de l'opérateur associé en seconde quantification à l'opérateur à 1 particule étudié plus haut

$$\frac{1}{2mc^2} U^2$$

Conclusion pour le calcul à l'ordre 2 en V

On obtient le même hamiltonien effectif à partir de la théorie à 1 particule et à partir de la théorie à N particules.

Cet hamiltonien décrit

- l'énergie cinétique
- l'interaction du moment magnétique de spin avec le champ magnétique total.

T-19 T-20

VII.6

Faut-il tenir compte du déplacement global Δ de \bar{E}_i vers le bas ?

Seule compte la position de \bar{E}_i (multiplicité à $1e^-$) par rapport à \bar{E}_0 (vide)

Or, si on calcule H_{eff} dans \bar{E}_0 , on trouve, au 2^{ème} ordre en V, le même déplacement global Δ

$$-\frac{1}{2mc^2} P_0 U^2 P_0 = -\Delta$$

En effet, des 4 lignes de T-19, seule la 3^{ème} ligne a un élément de matrice non nul dans \bar{E}_0 , et il faut de plus prendre $k' = k'''$, $k = k''$ (création et destruction virtuelles d'une paire e^+, e^-). On retombe alors sur l'expression Δ donnée en T-18.

Donc, il ne faut pas tenir compte de Δ car \bar{E}_0 et \bar{E}_i sont déplacés de la même quantité.

T-21

Un intermédiaire de calcul

T-22

commode pour l'étude de l'ordre 3

Commutateur de 2 opérateurs à une particule en seconde quantification (on ne distinguera pas les c et les b)

$$B = \sum_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} c_{\alpha}^+ c_{\beta}$$

$$C = \sum_{\gamma\delta} C_{\gamma\delta} c_{\gamma}^+ c_{\delta}$$

Que vaut le commutateur $[B, C]$?

$$BC = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} B_{\alpha\beta} C_{\gamma\delta} c_{\alpha}^+ c_{\beta} c_{\gamma}^+ c_{\delta}$$

$$\text{Or } c_{\beta} c_{\gamma}^+ = \delta_{\beta\gamma} - c_{\gamma}^+ c_{\beta}$$

$$\hookrightarrow BC = \sum_{\alpha\delta} \sum_{\beta} B_{\alpha\beta} C_{\beta\delta} c_{\alpha}^+ c_{\delta} = (BC)_{\alpha\delta}$$

$$- \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} B_{\alpha\beta} C_{\gamma\delta} c_{\alpha}^+ c_{\gamma}^+ c_{\beta} c_{\delta}$$

$$BC = Op. \bar{a} \text{ 1 particule} + Op. \bar{a} \text{ 2 particules}$$

$$BC = \sum_{\alpha\beta} (B\mathcal{E})_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} B_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} c_{\beta}$$

Un calcul analogue donne, en changeant les indices (nuds) dans la 2^{ème} ligne :

$$CB = \sum_{\alpha\beta} (\mathcal{E}B)_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{E}_{\gamma\delta} B_{\alpha\beta} c_{\gamma}^{\dagger} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} c_{\delta}$$

On anticommuté ensuite dans la dernière ligne c_{γ}^{\dagger} et c_{α}^{\dagger} , c_{β} et c_{δ} , ce qui globalement laisse le signe inchangé :

$$CB = \sum_{\alpha\beta} (\mathcal{E}B)_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{E}_{\gamma\delta} B_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} c_{\beta}$$

Finalement

$$[C, B] = \sum_{\alpha, \beta} [\mathcal{E}, B]_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} [B_{\alpha\beta}, \mathcal{E}_{\gamma\delta}] c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} c_{\beta}$$

T-23 T-24

Conclusion

VII-7

Le commutateur $[B, C]$ de 2 opérateurs en seconde quantification associés aux opérateurs B et \mathcal{E} de la théorie à 1 particule est la somme de 2 opérateurs

- d'une part, l'opérateur en seconde quantification associé au commutateur $[\mathcal{E}, B]$ de la théorie à 1 particule.
- d'autre part, un opérateur à 2 particules proportionnel au commutateur $[B_{\alpha\beta}, \mathcal{E}_{\gamma\delta}]$

Si les éléments de matrice $B_{\alpha\beta}$ et $\mathcal{E}_{\gamma\delta}$ ne demeurent pas des opérateurs vis à vis d'autres variables (comme celle du rayonnement quantifié), le commutateur des 2 nombres $B_{\alpha\beta}$ et $\mathcal{E}_{\gamma\delta}$ est nul, et $[B, C]$ se calcule simplement à partir de $[\mathcal{E}, B]$

Importance de la quantification du rayonnement

T-25

Dans le problème étudié ici, les indices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, sont relatifs aux états dans lesquels se trouvent les électrons et positrons

Si le rayonnement n'est pas quantifié, $B_{\alpha\beta}$ et $\mathcal{E}_{\gamma\delta}$ sont des nombres, leur commutateur est nul, et la théorie à N particules n'introduit rien de nouveau dans $[B, C]$ qui ne soit déjà contenu dans $[\mathcal{E}, B]$

Si par contre le rayonnement est quantifié, $B_{\alpha\beta}$ et $\mathcal{E}_{\gamma\delta}$ restent des opérateurs de rayonnement, dont le commutateur n'est en général pas nul et les résultats des 2 théories sont en général différents.

Remarque après T-5

T-26

Si on veut obtenir tous les termes en $\frac{1}{c^2}$, il faut encore tenir compte d'un dernier terme en $\frac{1}{c^2}$ qui apparaît à l'ordre 4 en V

3 dénominateurs d'énergie : $\frac{1}{m^3 c^6}$

4 numérateurs $U(V, C)$: c^4

↳ Terme en $\frac{1}{c^2}$

Dans ce terme, seule, la partie non-diagonale U de V intervient (il faut avoir toujours U au numérateur). Pour calculer ce terme, on peut donc faire $W = 0$

Or, les $U_{\alpha\beta}$ commutent entre eux (ils ne contiennent que $\vec{A}(\vec{r})$ qui commute avec lui-même). On montre alors aisément que le dernier terme en $\frac{1}{c^2}$ qui apparaît à l'ordre 4 a la même expression dans la théorie à 1 et N particules. Il vaut :

$$-\frac{U^4}{8m^3 c^6} = -\frac{1}{8m^3 c^2} \left[\vec{\Pi}_t^2 - c \vec{h} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_t \right]^2$$

Correction "maxwell-vitesse" qui sera rajoutée aux termes en $\frac{1}{m^2 c^2}$ du calcul à l'ordre 3 du § qui suit.

Etude des corrections relativistes par la méthode de l'hamiltonien effectif (suite et fin)

Buts de ce cours

- Terminer le calcul de l'hamiltonien effectif.
- Interpréter physiquement les différents termes obtenus au cours de ce calcul

Plan

Suite et fin du calcul de l'hamiltonien effectif

- Calcul de l'ordre 3 T1 à T11
- Récapitulation et identification des différents termes T12 à T13

Discussion physique

- Délocalisation de la charge due au principe de Pauli et aux effets à plusieurs particules T14 à T16
- Interprétation des termes de Darwin T17
- Réduction de la self-énergie électrostatique T18
- Moment magnétique de spin T19
- Nouvelle correction de self-énergie T20
- Couplage spin-orbite T21

Ordre 3 Calcul de

T1

$$-\frac{1}{8m^2c^4} P_+ [U, [U, W]] P_+ \quad \text{Théorie à 1 particule}$$

$$-\frac{1}{8m^2c^4} P_+ [U, [U, W]] P_+ \quad \text{Théorie à N particules}$$

U et V opérateurs en 2^{ème} quantification associés

$$U = c\vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi}_t \quad \vec{\Pi}_t = \vec{p} - e\vec{A}_0(\vec{r}) - e\vec{A}(\vec{r})$$

$$W = \mathcal{H}_R + e\phi_0(\vec{r}) \quad \mathcal{H}_R = \sum_{kE} \hbar\omega (a_{kE}^\dagger a_{kE} + \frac{1}{2})$$

Notations pour les potentiels et les champs

Indice 0 : potentiels et champs statiques appliqués

Pas d'indice : potentiels et champs de rayonnement quantifié (voir développement de $\vec{A}(\vec{r})$ et $\vec{E}(\vec{r})$ T.3 page IV-2)

Indices t : potentiels et champs totaux

$$\vec{A}_t = \vec{A}_0 + A \quad \phi_t = \phi_0 \quad \vec{E}_t = \vec{E}_0 + \vec{E} - \vec{\nabla}\phi_0$$

Quelques commutateurs utiles

T2

faisant intervenir le rayonnement quantifié

$$[a_{kE}, a_{k'E'}^\dagger] = \delta_{kk'} \delta_{EE'}$$

$$[a_{kE}, a_{k'E'}] = [a_{kE}^\dagger, a_{k'E'}^\dagger] = 0$$

A partir de ces commutateurs et des expressions donnant $\vec{A}(\vec{r})$, \mathcal{H}_R , $\vec{E}(\vec{r})$ en fonction des a_{kE} et a_{kE}^\dagger , on déduit aisément

$$[\vec{A}(\vec{r}), \vec{A}(\vec{r}')] = 0$$

$$[\vec{A}(\vec{r}), \mathcal{H}_R] = -i\hbar \vec{E}(\vec{r})$$

$$[A_i(\vec{r}), E_j(\vec{r}')] = \sum_{kE} -\frac{i\hbar}{\epsilon_0 L^3} E_i \cdot E_j$$

$$= -\sum_{kE} \frac{i\hbar}{3\epsilon_0 L^3} \delta_{ij}$$

Calcul de $[U, W]$

$$[U, W] = c [\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e \vec{A}_0 - e \vec{A}), e \phi_0 + \mathcal{H}_R]$$

Le seul commutateur non nul avec ϕ_0 est

$$c [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, e \phi_0] = e c \vec{\alpha} \cdot [\vec{p}, \phi_0] = + i e \hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E}_0$$

$$- i \hbar \vec{\nabla} \phi_0 = + i \hbar \vec{E}_0$$

Le seul commutateur non nul avec \mathcal{H}_R est

$$c [-e \vec{\alpha} \cdot \vec{A}(\vec{r}), \mathcal{H}_R] = + i e \hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E}$$

Finalement,

$$[U, W] = i e \hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E}_t$$

Calcul de $[U, [U, W]]$

$$[U, [U, W]] = i e \hbar c^2 [\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}_t, \vec{\alpha} \cdot \vec{E}_t]$$

D'après la formule (voir T6, page VII-2)

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{A})(\vec{\alpha} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

on déduit aisément

$$[(\vec{\alpha} \cdot \vec{A}), (\vec{\alpha} \cdot \vec{B})] = \sum_i [A_i, B_i] + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{A})$$

T3

T4

Par suite,

$$\frac{1}{i e \hbar c^2} [U, [U, W]] = \sum_i [\pi_{it}, E_{it}] + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi}_t \times \vec{E}_t - \vec{E}_t \times \vec{\pi}_t)$$

Calcul de $[\pi_{it}, E_{it}]$

$$[\pi_{it}, E_{it}] = [p_i - e A_{it}(\vec{r}), E_{it}(\vec{r})]$$

$$= [p_i, E_{it}(\vec{r})] - e [A_{it}(\vec{r}), E_{it}(\vec{r})]$$

$$= - i \hbar \partial_i E_{it}(\vec{r}) \quad [A_i(\vec{r}), E_i(\vec{r})] \text{ voir T2}$$

Or $\sum_i \partial_i E_{it}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}) = 0$ car le rayonnement libre est transverse

$$\sum_i \partial_i E_{i0}(\vec{r}) = - \sum_i \partial_i \partial_i \phi_0(\vec{r}) = - \Delta \phi_0(\vec{r}),$$

$$\hookrightarrow \sum_i [\pi_{it}, E_{it}] = i \hbar \Delta \phi_0(\vec{r}) + \sum_{kE} \frac{i e \hbar}{\epsilon_0 L^3}$$

Récapitulation pour l'ordre 3

et pour la théorie à 1 particule

On trouve l'hamiltonien suivant agissant dans \mathcal{E}_+

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(3)} = \frac{e \hbar^2}{8 m^2 c^2} \Delta \phi_0(\vec{r})$$

$$+ \frac{e \hbar}{8 m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\pi}_t \times \vec{E}_t - \vec{E}_t \times \vec{\pi}_t]$$

$$+ \sum_{kE} \frac{e^2 \hbar^2}{8 m^2 c^2 \epsilon_0 L^3}$$

Un dernier terme en $\frac{1}{c^2}$ apparaît à l'ordre 4 (voir remarque T26 page VII-7)

$$- \frac{1}{8 m^3 c^2} [\vec{\pi}_t^2 - e \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_t]^2$$

T-5

Calcul de $[U, V]$ (Théorie à N particules) T-6

$$U = \sum_{\alpha\beta} (c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}_t)_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$$

$$W = \sum_{\gamma\delta} \underbrace{e(\phi_0)_{\gamma\delta}}_{W_0} c_\gamma^\dagger c_\delta + \mathcal{H}_R$$

\mathcal{H}_R agit dans l'espace de Fock des photons c'est un multiple de $\mathbb{1}$ dans l'espace de Fock des e^+ et e^- : c'est pourquoi il ne s'exprime pas en fonction des c et c^\dagger

$$[U, W] = [U, W_0] + [U, \mathcal{H}_R]$$

$$[U, \mathcal{H}_R] = \sum_{\alpha\beta} [(c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}_t)_{\alpha\beta}, \mathcal{H}_R] c_\alpha^\dagger c_\beta$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \underbrace{[c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}_t, \mathcal{H}_R]}_{= i e \hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E} \text{ d'après (T-2)}} c_\alpha^\dagger c_\beta$$

Donc

$$[U, \mathcal{H}_R] = i e \hbar c \sum_{\alpha\beta} (\vec{\alpha} \cdot \vec{E})_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$$

Calcul de $[U, W_0]$

D'après la formule générale (T23, page VII-7)

$$[U, W_0] = \sum_{\alpha\beta} [U, e\phi_0]_{\alpha\beta} c_\alpha^+ c_\beta + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} [U_{\alpha\beta}, (e\phi_0)_{\gamma\delta}] c_\alpha^+ c_\gamma^+ c_\delta c_\beta$$

Mais $(e\phi_0)_{\gamma\delta}$ est un nombre qui commute avec $U_{\alpha\beta}$. Donc la 2^{ème} ligne donne 0. Quant à la 1^{ère}

$$[U, e\phi_0]_{\alpha\beta} = [c_\alpha^+ \vec{\pi}_\alpha, e\phi_0] = i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E}_0$$

Finalement, en regroupant les 2 résultats précédents

$$[U, W] = i\hbar c \sum_{\alpha\beta} (\vec{\alpha} \cdot \vec{E}_t)_{\alpha\beta} c_\alpha^+ c_\beta$$

$[U, W]$ est donc simplement l'opérateur à 1 particule associé en seconde quantification à

$$[U, W] = i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{E}_t$$

T-7

T-8

VIII-3

Calcul de $[U, [U, W]]$ Théorie à N particules

Toujours d'après T23, page VII-7, on obtient

$$[U, [U, W]] = \sum_{\alpha\beta} ([U, [U, W]])_{\alpha\beta} c_\alpha^+ c_\beta + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} [U_{\alpha\beta}, [U, W]_{\gamma\delta}] c_\alpha^+ c_\gamma^+ c_\delta c_\beta$$

1^{ère} ligne : Même résultat que la théorie à 1 particule

2^{ème} ligne : Terme nouveau

Calcul des commutateurs de la 2^{ème} ligne

$$i\hbar c^2 [(\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}_0 - e\vec{A}))_{\alpha\beta}, (\vec{\alpha} \cdot (\vec{E}_0 + \vec{E}))_{\gamma\delta}]$$

Seul $(\vec{\alpha} \cdot \vec{A})_{\alpha\beta}$ et $(\vec{\alpha} \cdot \vec{E})_{\gamma\delta}$ ne commutent pas car ils restent des opérateurs vis à vis des photons. En utilisant les développements de \vec{A} et \vec{E} en $a_{k\epsilon}$ et $a_{k\epsilon}^+$ et les commutateurs T2, on obtient pour α terme

$$- \sum_{k\epsilon} \frac{e^2 \hbar^2 c^2}{2\epsilon_0 L^3} [(\vec{E} \cdot \vec{\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}})_{\alpha\beta}, (\vec{E} \cdot \vec{\alpha} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}})_{\gamma\delta} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha} - \vec{k}]$$

Réduction de $c_\alpha^+ c_\gamma^+ c_\delta c_\beta$

Réintroduisons la distinction entre les c et les b. Par suite du caractère non diagonal de $\vec{\alpha}$, le produit $c_\alpha^+ c_\beta$ (associé à $U_{\alpha\beta}$) est, soit $c_\alpha^+ b_\beta^+$, soit $b_\alpha c_\beta$. De même, le produit $c_\gamma^+ c_\delta$ (associé à $(\vec{\alpha} \cdot \vec{E}_t)_{\gamma\delta}$) est, soit $c_\gamma^+ b_\delta^+$, soit $b_\gamma c_\delta$.

Finalement, $c_\alpha^+ c_\gamma^+ c_\delta c_\beta$ comporte en fait 4 termes

- $c_\alpha^+ c_\gamma^+ b_\delta^+ b_\beta^+$ crée $2e^+$ et $2e^-$ \rightarrow valeur moyenne nulle dans E_0 et E ,
- $b_\alpha b_\gamma c_\delta c_\beta$ détruit $2e^+$ et $2e^-$ \rightarrow valeur moyenne nulle dans E_0 et E ,
- $c_\alpha^+ b_\gamma c_\delta b_\beta^+$
- $b_\alpha c_\gamma^+ b_\delta^+ c_\beta$

Seules, les 2 dernières lignes peuvent donner une contribution dans E_0 et E ,

T-9

Valeur moyenne du nouveau terme dans E_0 (vide)

Valeur moyenne nulle. Dans la 3^{ème} ligne, c_δ détruit un électron qui n'existe pas. Idem pour c_β dans la 4^{ème} ligne

Valeur moyenne des nouveaux termes dans E , (multiplicité à 1 particule)

$$P_i c_\alpha^+ b_\gamma c_\delta b_\beta^+ P_i = - P_i c_\alpha^+ c_\delta b_\gamma b_\beta^+ P_i = \delta_{\gamma\beta} - b_\beta^+ b_\gamma$$

$b_\beta^+ b_\gamma$ agissant dans P_i donne 0 (destruction d'un positron γ qui n'existe pas)

$$P_i c_\alpha^+ b_\gamma c_\delta b_\beta^+ P_i = - \delta_{\gamma\beta} P_i c_\alpha^+ c_\delta P_i$$

En revenant à l'élément de matrice du commutateur (voir T8), on a

$$\sum_{\gamma\beta} [(\vec{E} \cdot \vec{\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}})_{\alpha\beta}, (\vec{E} \cdot \vec{\alpha} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}})_{\gamma\delta}] \delta_{\beta\gamma} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha} - \vec{k}]$$

$$= 2 (\vec{E} \cdot \vec{\alpha})_{\alpha\delta}^2 = 2 \delta_{\alpha\delta}$$

T-10

Enfin, on obtient pour la contribution de la 3^{ème} ligne de T-9

$$+ \sum_{k \in E} \frac{e^2 \hbar^2 c^2}{E_0 L^3} P_i \sum_{\alpha} C_{\alpha}^+ C_{\alpha} P_i$$

N_e : nombre total de e^-
 $P_i N_e P_i = P_i$ car $N_e = 1$ dans E_i .

Le calcul de la 4^{ème} ligne de T-9 conduit à 1 résultat identique

Conclusion pour $[U, [U, W]]$

Le terme nouveau introduit par la théorie à 1 particule dans le calcul de $[U, [U, W]]$ s'écrit donc finalement

$$+ \sum_{k \in E} \frac{2e^2 \hbar^2 c^2}{E_0 L^3} P_i$$

- Il faut en tenir compte car le vide n'est pas affecté par $[U, [U, W]]$

T-11 T-12 Récapitulation pour l'hamiltonien VIII-4

effectif dans E_i (théorie à N particule)
 C'est l'hamiltonien effectif à 1 particule associé en seconde quantification à

$$\mathcal{H}_{eff} = mc^2 + \mathcal{H}_R + e \phi_0(\vec{r}) + V_{Coulomb} + \frac{\vec{\pi}_k^2}{2m} - \frac{e \hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_k(\vec{r}) + \frac{e \hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta \phi_0 + \frac{e \hbar}{8m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\pi}_k \times \vec{E}_k - \vec{E}_k \times \vec{\pi}_k] - \sum_{k \in E} \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2 E_0 L^3} - \frac{1}{8m^2 c^2} [\vec{\pi}_k^2 - e \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_k]^2$$

Différence avec la théorie à 1 particule :

Différence de signe pour le terme

$$- \sum_{k \in E} \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2 E_0 L^3} \quad (\text{voir T-5})$$

Le signe correct est le signe - et non +
 Ce terme peut d'ailleurs s'écrire aussi (voir la définition de E_v^0 en T-12 page IV-4)

$$- \sum_{k \in E} \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2 E_0 L^3} = - \sum_{k \in E} E_v^0 \frac{\hbar \omega}{2mc^2}$$

Identification des différents termes de \mathcal{H}_{eff} T-13

- mc^2 : énergie au repos
- \mathcal{H}_R : énergie des photons
- $e \phi_0(\vec{r})$: couplage avec le potentiel électrostatique externe
- $V_{Coulomb}$: Self-énergie électrostatique
- $\frac{\vec{\pi}_k^2}{2m}$: énergie cinétique
- $-\frac{e \hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_k$: couplage du moment magnétique de spin avec le champ magnétique total
- $\frac{e \hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta \phi_0$: terme de Darwin
- $\frac{e \hbar}{8m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\pi}_k \times \vec{E}_k - \vec{E}_k \times \vec{\pi}_k]$: couplage spin-orbite
- $-\sum_{k \in E} E_v^0 \frac{\hbar \omega}{2mc^2}$: Correction à la self-énergie (effets relativistes et à plusieurs particules)
- $-\frac{1}{8m^2 c^2} [\vec{\pi}_k^2 - e \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_k]^2$: Correction "masse vitesse"

Discussion physique T-14

Modification du "vide" par la présence d'un e^-

Dans le "vide", tous les états $E < 0$ sont occupés. Seules sont observables les déviations par rapport au vide.

Quand on rajoute un e^- d'énergie $E > 0$ par suite du principe de Pauli, les électrons du "vide" dans le même état de spin que lui ne peuvent se trouver au même endroit.

Le principe de Pauli introduit des corrélations entre les positions de 2 fermions dans le même état de spin. Corrélations existant même en l'absence de toute interaction et liés uniquement au caractère antisymétrique de la fonction d'onde.

Par sa seule présence, et sans qu'il interagisse avec eux, un électron $E > 0$ repousse dans les électrons du vide dans le même état de spin. La charge totale est bien sûr conservée, mais il y a apparition d'une distribution de charge délocalisée autour de l'électron.

Expression quantitative de l'idée
précédente

T-15 T-16

Etude de la fonction de corrélation
de la densité $\langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') \rangle = G(\vec{r} - \vec{r}')$

- Calcul dans la théorie à 1 particule
- Calcul dans la théorie à N particules

(Voir V. WEISSKOPF, Phys. Rev. 56, 72 (1939))

- Dans le 1^{er} cas, (théorie à 1 particule), on trouve $e^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}')$: charge ponctuelle
- Dans le 2^{ème} cas (théorie à N particules) on trouve une fonction de largeur \hbar/mc qui s'exprime à partir d'une fonction de Hankel de 1^{ère} espèce

Distribution de charge délocalisée s'étendant sur des dimensions de l'ordre de la longueur d'onde de Compton \hbar/mc

Conclusion: dans la théorie à N particules, à un électron d'énergie $E > 0$ est associée une distribution de charge délocalisée sur un volume de l'ordre de $(\hbar/mc)^3$

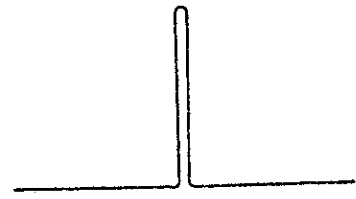


FIG. 1a. Schematic charge distribution of the electron.

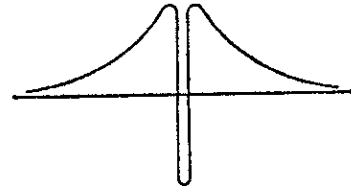


FIG. 1b. Schematic charge distribution of the vacuum electrons in the neighborhood of an electron.

Figure extraite de l'article de
V. WEISSKOPF cité plus haut

Interprétation du terme de Darwin T-17

Lorsqu'un potentiel électrostatique externe ϕ_0 interagit avec un électron d'énergie $E > 0$, il interagit en fait avec la distribution de charge délocalisée décrite précédemment. Il faut donc ajouter à $e\phi_0(\vec{r})$ un terme faisant intervenir les dérivées secondes de $e\phi_0$ multipliées par le carré de la dimension de la distribution de charge, c-à-d \hbar^2/m^2c^2 . On retrouve ainsi le terme de Darwin $\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta\phi_0$

Analogie avec le moyennage de ϕ_0 dû à la vibration de e dans les fluctuations du vide. Mais la délocalisation de l'électron a ici une origine autre que les fluctuations du vide. C'est la corrélation spatiale avec les électrons du vide associée au principe de Pauli.

Remarque: on ne tient pas compte ici de la perturbation des électrons du vide par le potentiel ϕ_0 appliqué. Effet apparaissant aux ordres supérieurs (polarisation du vide)

Réduction de la self-énergie électrostatique. T-18

La délocalisation de la charge discutée plus haut est également responsable d'une réduction de la self-énergie électrostatique

Effet non calculé ici puisqu'on ne tient pas compte de V_{Coulomb} aux ordres supérieurs à 1 (de toute façon, la compense à $\hbar ck_m \ll mc^2$ introduit dans le calcul de V_{Coulomb} une longueur caractéristique $1/k_m \gg \hbar/mc$)

Résultats du calcul complet (tenant compte des modes relativistes $\hbar\omega \gg mc^2$ la divergence de la self-énergie électrostatique passe d'une divergence linéaire

$$c^2 k_m = \alpha mc^2 \cdot \frac{\hbar c k_m}{mc^2}$$

à une divergence logarithmique

$$\frac{\alpha}{\pi} mc^2 \log \frac{\hbar c k_m}{mc^2}$$

Le moment magnétique de spin

Le calcul précédent a fait apparaître à l'ordre 2 un moment magnétique de spin avec un facteur $g = 2$

Impossibilité de comprendre ce moment magnétique comme résultant de la rotation d'un corps chargé sur lui-même (on trouverait $g = 1$)

Importance des effets à plusieurs particules. La présence d'un électron $E > 0$ dans un état de spin $|\uparrow\rangle$ induit une distribution de charge autour de lui (effet du principe de Pauli). Cette distribution de charge n'est pas statique. Elle tourne autour de l'électron (dans le sens direct si le spin est dans l'état \uparrow). Contribution de cette circulation de charge au moment magnétique de l'ensemble? (Problème à approfondir)

T-19 T-20

$$\text{Terme} = \sum_{kE} \frac{E_k^0 \hbar \omega}{2mc^2}$$

VIII-6

Nouveau terme de self énergie lié aux effets à plusieurs particules et aux relations de commutation du champ quantique.

Il apparaît avec un signe - (et non avec un signe + comme c'est le cas dans la théorie à 1 particule)

On retrouve là encore que les effets à plusieurs particules réduisent la self énergie calculée dans la théorie à une particule.

Résultat du calcul complet (tenant compte des modes $\hbar \omega \geq mc^2$): la divergence de la self-énergie totale (électrostatique + celle due aux fluctuations du vide + magnétique) est logarithmique.

Couplage spin-orbite

T-21

Calculons tout d'abord l'interaction du moment magnétique de spin \vec{M}_S avec le champ magnétique motional \vec{B}_{mot} "vu" par le spin par suite de son déplacement à la vitesse \vec{v} dans le champ électrique total \vec{E}_k : $-\vec{M}_S \cdot \vec{B}_{\text{mot}}$

$$\vec{B}_{\text{mot}} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}_k$$

Or $\vec{v} = \frac{\vec{\Pi}_k}{m}$, et l'opérateur hermitique associé à $\vec{v} \times \vec{E}_k$ est

$$\frac{1}{2m} (\vec{\Pi}_k \times \vec{E}_k - \vec{E}_k \times \vec{\Pi}_k)$$

En remplaçant \vec{M}_S par $\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma}$, on trouve

$$-\vec{M}_S \cdot \vec{B}_{\text{mot}} = \frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{\Pi}_k \times \vec{E}_k - \vec{E}_k \times \vec{\Pi}_k]$$

Résultat qui coïncide avec celui de T-12 à un facteur 2 près.

Origine de ce facteur 2: le référentiel au repos de l'électron n'est pas un référentiel d'inertie, et il apparaît dans ce référentiel un couple d'inertie, d'origine cinématique, et dont il faut tenir compte (précession de Thomas)

9/12/80

Corrections radiatives stimulées et spontanées
compte tenu du spin

Buts de ce cours

- Reprendre la discussion du cours IV en partant d'un hamiltonien électrons - rayonnement contenant le spin, correct à l'ordre $1/c^2$ inclus, et sans approximation dipolaire électrique.
- Calculer tous les effets stimulés liés au spin et les interpréter physiquement.

Plan

- A - Hamiltonien du système électrons - champ de rayonnement quantifié
T1 → T4
- B - Calcul de l'hamiltonien effectif décrivant les corrections radiatives stimulées et spontanées
T5 → T8
- C - Etude des effets stimulés
 - 1 - Termes indépendants des spins (mouvement par rapport à ceux du cours IV) T9 → T10
 - 2 - Termes dépendant des spins T11 → T20
 - 3 - Conclusion T21 → T22

Hamiltonien du système électrons - champ de rayonnement quantifié [T-1]

Dans l'expression de H_{eff} à l'ordre 2 inclus en $1/c^2$, on sépare la partie purement électromagnétique H_e , celle relative au seul rayonnement H_R , et celle qui agit sur les 2 types de variables à la fois H_{eR}

$$H_{eff} = H_e + \text{Self-énergie} + H_R + H_{eR}$$

$$H_e = mc^2 + \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} + e\phi_0(\vec{r}) - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$$

$$+ \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta\phi_0 - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}_0 \times \vec{\pi}_0) - \frac{1}{8m^2c^2} (\vec{\pi}_0^2 - e\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0)^2$$

1^{ère} ligne : H_p (hamiltonien de Pauli)
2^{ème} ligne : H_{fs} (hamiltonien de structure fine)

Self-énergie : Termes constants provenant de $V_{Coulomb}$ et des effets à plusieurs particules, et dont on sépare la contribution mode par mode

$$\text{Self-énergie} = \sum_{kE} \left(E_{\nu}^0 \frac{mc^2}{\hbar\omega} + E_{\nu}^0 \frac{\hbar\omega}{mc^2} \right)$$

$$H_R = \sum_{kE} \hbar\omega (a_{kE}^+ a_{kE} + \frac{1}{2})$$

Hamiltonien d'interaction H_{eR} [T-2]

On sépare la partie linéaire en a et a^\dagger (terme $H_{eR}^{(1)}$ à 1 photon) et la partie quadratique (terme $H_{eR}^{(2)}$ à 2 photons)

$$H_{eR}^{(2)} = \frac{e^2}{2m} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}) + \frac{e^2\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}(\vec{r}) \times \vec{A}(\vec{r}))$$

$$- \frac{e^2}{8m^2c^2} \left[\vec{A}(\vec{r}) \times \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \times \vec{A}(\vec{r}) \right]^2 - \frac{e^2\vec{A}(\vec{r})}{2m^2c^2} \left[\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \right]$$

$$H_{eR}^{(1)} = -\frac{e}{m} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\pi}_0 - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(\vec{r})$$

$$+ \frac{e^2\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}_0 \times \vec{A}(\vec{r}))$$

$$- \frac{e\hbar}{8m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}(\vec{r}) \times \vec{\pi}_0 - \vec{\pi}_0 \times \vec{E}(\vec{r}))$$

$$+ \frac{e}{2m^2c^2} \left\{ \vec{\pi}_0 \cdot \vec{A}(\vec{r}) \left(\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \right) + \text{sym.} \right\}$$

Ordres de grandeur des différents termes de H_{ER}

4 énergies caractéristiques

$\hbar\omega, E_L, E_V (E_V^0 \text{ ou } E_V^N), mc^2$

Termes à 2 photons

(a) $\sim E_V$ (b) $\sim E_V \frac{\hbar\omega}{mc^2}$

(c) $\sim E_V \frac{E_L}{mc^2}$ (d) $\sim E_V \frac{E_L}{mc^2}$

Termes à 1 photon

(1) $\sim \sqrt{E_V E_L}$

(2) $\sim \hbar\omega \sqrt{\frac{E_V}{mc^2}} = \sqrt{E_V E_L} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{E_L} mc^2}$

(3) $\sim \sqrt{E_V E_L} \frac{E_L}{mc^2}$ (4) $\sim \sqrt{E_V E_L} \frac{\hbar\omega}{mc^2}$

(5) $\sim \sqrt{E_V E_L} \frac{E_L}{mc^2}$

T-3 T-4 Interaction electron-mode ω IX-2

Comme dans le cours IV, on peut écrire (voir T5, p. IV-2) :

$H_{ER} = V^+ a^+ + V^- a + V^{+-} a^+ a + V^{-+} a a^+$
(on néglige tout de suite $V^{++} a^{+2}$ et $V^{--} a^2$ qui sont non diagonaux, et en e^2 , et donnent donc des corrections radiatives en E_V^2)

Différences avec le cours IV

(i) - V^\pm est, non plus un seul terme (associé au terme (1) de $H_{ER}^{(1)}$), mais une somme de 5 termes (1+2+3+4+5)

V^{+-} et V^{-+} sont des sommes de 4 termes ((a)+(b)+(c)+(d)), et non plus un seul terme (a)

(ii) Plus d'approximation dipolaire électrique

$V_i^\pm = v_i^\pm e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ($i=1,2,3,4,5$)

On garde les $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ dans V^\pm

Par contre, dans V^{+-} et V^{-+} , les $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ se contraignent pour donner 1 et disparaissent.

Hamiltonien effectif décrivant les effets du couplage electron-photon dans la multiplicité E_N (electron + N photons ω)

T-5

Même valeur que dans le cours IV (voir T6 à T10 pages IV-2 et IV-3). On trouve

$H_{eff}(\text{correct. radiat.}) = (N+1)R + NS =$

$= \underbrace{N(R+S)}_{\text{Effets stimulés}} + \underbrace{R}_{\text{Effets spontanés}}$

Mêmes expressions pour R et S que dans T-10, page IV-3.

Différences

(i) 4 termes dans V^{+-} et V^{-+} au lieu d'un.

(ii) Dans le terme du 2^{ème} ordre (transitions virtuelles entre E_N et $E_{N\pm 1}$), il y a 15 termes au lieu d'un.

5 termes "carrés" (i, i) $i=1,2,3,4,5$
 $v_i^{(+)} v_i^{(-)}, v_i^{(-)} v_i^{(+)}$

10 termes "rectangles" (i, j) $j \neq i$
 $v_i^{(+)} v_j^{(-)}, v_i^{(-)} v_j^{(+)}, v_j^{(+)} v_i^{(-)}, v_j^{(-)} v_i^{(+)}$

(iii) On garde les $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ dans V_\pm

Forme opérationnelle de R et S

T-6

Même valeur que dans le cours IV

Dans les termes du 2^{ème} ordre, on développe les dénominateurs d'énergie en puissances de $\frac{E_L}{\hbar\omega}$ pour faire apparaître l'hamiltonien électronique au numérateur. Exemple

$V_i^- \frac{1}{H_e - \hbar\omega} V_j^+ = -\frac{1}{\hbar\omega} V_i^- V_j^+$

$-\frac{1}{\hbar^2 \omega^2} V_i^- H_e V_j^+ - \frac{1}{\hbar^3 \omega^3} V_i^- H_e^2 V_j^+ - \dots$

Ordres de grandeur

Soit d_i l'ordre de grandeur de V_i (voir T3). Le terme du 2^{ème} ordre en V_i et V_j , développé en puissances de $\frac{E_L}{\hbar\omega}$ sera noté $(ij)(k)$

$(i, j)(k) \sim \frac{d_i d_j}{\hbar\omega} \left(\frac{E_L}{\hbar\omega}\right)^k$

↑ Terme croisé (ij) ↑ Terme d'ordre k en $\frac{E_L}{\hbar\omega}$

Comment tenir compte des $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$? (T-7) T-8] Conclusion sur les ordres de grandeur (IX-3)

Quand on fait remonter H_e au numérateur, on voit apparaître $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ $H_e e^{\mp i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
 $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$: opérateur translation dans l'espace des \vec{p}
 $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}} H_e(\vec{r}, \vec{\pi}_0) e^{\mp i\vec{k}\cdot\vec{r}} = H_e(\vec{r}, \vec{\pi}_0 \mp \hbar\vec{k})$

Il suffit de tenir compte de cette relation pour le terme $\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$ de H_e .
 En effet, tous les autres termes (où $\vec{\pi}_0$ apparaît) sont déjà d'ordre $1/2$ et les corrections correspondantes seraient en $1/3$.
 Finalement, l'effet des $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ se réduit à
 $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}} H_e e^{\mp i\vec{k}\cdot\vec{r}} = H_e \mp \frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{\pi}_0}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Ordre de grandeur

$$E_L \left(1 + \frac{1}{E_L} \hbar\omega \sqrt{\frac{E_L}{mc^2}} + \frac{1}{E_L} \frac{\hbar^2 \omega^2}{mc^2} \right)$$

$$= \sum_{l=0}^2 E_L \left(\frac{\hbar\omega}{\sqrt{E_L mc^2}} \right)^l$$

Termes en V^{+-}, V^{-+} : d_a, d_b, d_c, d_d
 Termes du 2^{ème} ordre en V^{\pm}
 $(i, j) (k, l)$
 Terme croisé $V_i V_j$ Terme en $\left(\frac{E_L}{\hbar\omega}\right)^k$ Correction à l'approx. dipolaire électrique Terme en $\left(\frac{\hbar\omega}{\sqrt{E_L mc^2}}\right)^l$ avec $l=0,1,2$

Ordre de grandeur de $(i, j)(k, l)$

$$\frac{d_i d_j}{\hbar\omega} \left(\frac{E_L}{\hbar\omega}\right)^k \left(\frac{\hbar\omega}{\sqrt{E_L mc^2}}\right)^l$$

- Termes conservés à la fin du calcul
- Termes linéaires en E_V
 - Termes linéaires en E_L (réponse linéaire)
 - Termes les plus importants en E_L^2
 $E_L \frac{E_L}{\hbar\omega} \frac{E_V}{\hbar\omega}$
 - Termes les plus importants en $\frac{1}{mc^2}$
 $E_V \frac{\hbar\omega}{mc^2}, E_V \frac{E_L}{mc^2}$

Corrections radiatives stimulées (T-9)

① Termes indépendants du spin
 2 termes nouveaux, en plus des termes d'ordre 0 en $\frac{1}{c}$ du cours IV (T-22 p. IV-6)

(i) $-\frac{E_V^N}{mc^2} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$
 Origine: terme (d) de $H_{eR}^{(2)}$. On trouve que les termes (c) et (11)(12), eux aussi en $E_V^N \frac{E_L}{mc^2}$, se compensent

Interprétation: correction à l'énergie cinétique due à l'augmentation de masse E_V^N/c^2 associée à la vibration

(ii) $W'_p = \vec{\mu} \cdot \vec{k} \left[\vec{B}_0 \cdot \frac{\vec{\pi}_0}{mc} - (\vec{k} \cdot \vec{B}_0) \left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{\pi}_0}{mc}\right) - \left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{\pi}_0}{mc}\right) (\vec{k} \cdot \vec{B}_0) \right]$
 $\vec{k} = \frac{\vec{k}}{k} \quad \vec{\mu} = i \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2 \omega^2} \vec{E} \times \vec{E}^*$

W'_p n'existe que pour \vec{E} complexe
 Origine: Terme (11)(11) en $\frac{E_V^N}{\hbar\omega} \frac{E_L}{\sqrt{E_L mc^2}} \sim \frac{E_V^N}{\hbar\omega} \frac{E_L}{\hbar\omega} \frac{v}{c}$

Interprétation physique de W'_p (T-10)

Corrections relativistes en $\frac{v}{c}$ à l'énergie de couplage $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$ entre B_0 et le moment magnétique $\vec{\mu}$ associé au mouvement de vibration de e dans une onde polarisée circulaire ou elliptique.

Lorsque l'électron se déplace à la vitesse $\vec{v} = \frac{\vec{\pi}_0}{m}$ dans l'onde (\vec{k}, ω) il "voit" dans son référentiel une fréquence différente (effet Doppler), une direction de propagation différente (aberration), un champ électrique motionnel $\vec{v} \times \vec{B}$ (où \vec{B} est le champ magnétique de l'onde plane):
 $\vec{v} \times \vec{B} = \frac{\vec{v}}{c} \times (\vec{k} \times \vec{E})$

Lorsqu'on tient compte de ces 3 effets dans le calcul de $\vec{\mu}$, on retrouve exactement W'_p

Remarque: Pour les effets spontanés, W'_p disparaît dans la moyenne angulaire

② Termes dépendant du spin

[T-11] [T-12]

[IX-4]

On trouve 6 termes, 2 en $\frac{E_V^N \hbar \omega}{mc^2}$ qui se compensent exactement, 4 en $\frac{E_V^N E_L}{mc^2}$

Termes en $\frac{E_V^N \hbar \omega}{mc^2}$

$$(22)(00) = -\textcircled{b} = i\hbar \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{4m^2 c^2 \omega} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}^* \times \vec{E})$$

Termes en $\frac{E_V^N E_L}{mc^2}$

$$(22)(10) = \frac{E_V^N}{2mc^2} \frac{e\hbar}{2m} \times$$

$$\left\{ 2(\vec{k} \cdot \vec{B}_0)(\vec{k} \cdot \vec{\sigma}) + (\vec{E}^* \cdot \vec{B}_0)(\vec{E} \cdot \vec{\sigma}) + (\vec{E} \cdot \vec{B}_0)(\vec{E}^* \cdot \vec{\sigma}) \right\}$$

$$\textcircled{d} = \frac{E_V^N}{2mc^2} \frac{e\hbar}{2m} 2\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$$

$$(14)(00) = \frac{E_V^N}{2mc^2} \frac{e\hbar}{2m} \times$$

$$\left\{ -2\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 + (\vec{E}^* \cdot \vec{B}_0)(\vec{E} \cdot \vec{\sigma}) + (\vec{E} \cdot \vec{B}_0)(\vec{E}^* \cdot \vec{\sigma}) \right\}$$

$$(12)(11) = \frac{E_V^N}{2mc^2} \frac{e\hbar}{2m} \times$$

$$\left\{ 2[(\vec{k} \times \vec{E}^*) \cdot \vec{B}_0][(\vec{k} \times \vec{E}) \cdot \vec{\sigma}] + 2[(\vec{k} \times \vec{E}) \cdot \vec{B}_0][(\vec{k} \times \vec{E}^*) \cdot \vec{\sigma}] \right\}$$

Récapitulation en ce qui concerne les corrections radiatives stimulées dépendant du spin

La somme de tous les termes précédents peut s'écrire

$$- \frac{e\hbar}{2m} \sum_{ij} \delta g_{ij} \sigma_i B_{0j}$$

δg_{ij} : correction au facteur de Landé apparaissant sous forme d'un tenseur de Landé anisotrope

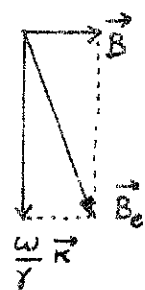
$$\delta g_{ij} = \frac{E_V^N}{mc^2} (\kappa_i \kappa_j - 2\delta_{ij})$$

Interprétation physique des termes (22)(00) [T-13]

Comme c'est un terme (22), il est relatif au couplage du spin avec le champ \vec{B} de l'onde incidente.

D'autre part, comme il est proportionnel à $\vec{E}^* \times \vec{E}$, il n'existe que pour une polarisation circulaire ou elliptique.

Prenons une polarisation circulaire pour l'onde incidente et plaçons nous dans le référentiel tournant avec le champ \vec{B} de l'onde incidente. Dans ce référentiel, le spin est soumis



- d'une part au champ \vec{B} qui est fixe
- d'autre part, au "champ de Larmor" - $\frac{\omega}{\gamma} \vec{k}$ ($\gamma = \frac{e}{m}$ rapport gyromagnétique)

Le spin tourne donc autour du champ efficace \vec{B}_e à la pulsation

$$\omega_e = \gamma \left(B^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2} \right)^{1/2} = \omega \left(1 + \frac{e^2 B^2}{m^2 \omega^2} \right)^{1/2} \approx \omega + \frac{e^2 E^2}{2m^2 c^2 \omega}$$

Revenons au référentiel du labo [T-14]

Comme \vec{B}_e est très voisin de $\vec{k} = \frac{\hbar \vec{k}}{\hbar k}$, dans le labo, le spin tourne autour de \vec{k} à la fréquence $\frac{e^2 E^2}{2m^2 c^2 \omega}$

Tout se passe comme si, à l'onde (\vec{k}, ω) polarisée circulairement, était associé un champ magnétique fictif statique

$$\vec{B}_f = \frac{e}{2mc^2} \frac{E^2}{\omega} \vec{k}$$

Le couplage, $-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_f$, du moment magnétique de spin avec \vec{B}_f redonne exactement le terme (22)(00).

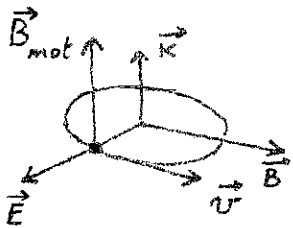
Phénomène déjà connu pour les atomes neutres : à tout champ de radio-fréquence magnétique tournant est associé un champ magnétique fictif parallèle à l'axe de rotation et proportionnel à l'intensité du champ tournant

Références : M. Le Dourneuf, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, S. Haroche, C.R. Acad. Sci. 272, 1048 (1971), " " " 272, 1131 (1971)

Interprétation physique du terme (b)

T-15

Supposons toujours la polarisation circulaire. L'électron tourne en phase avec \vec{E} sur une petite orbite circulaire.



Il "voit" donc un champ magnétique motionnel

$$\vec{B}_{mot} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}$$

qui est constant puisque \vec{E} et \vec{v} tournent ensemble. D'où une

énergie d'interaction :

$$\left(\frac{1}{2} \right) \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{mot}$$

Précession de Thomas

qui redonne exactement (b) quand on exprime \vec{v} en fonction de \vec{E} (T-2 p.V-1)

Complage "spin - petite orbite"

Complage qui n'existe que parce que la particule est chargée et tourne. Soit sous l'effet de \vec{E} (terme n'existent pas pour des atomes neutres)

Interprétation physique du terme (22)(10)

IX-5

(22) → c'est le couplage du spin avec le champ \vec{B} de l'onde qui intervient.

1 dans (10) → le champ statique \vec{B}_0 joue un rôle

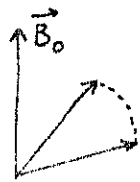
0 dans (10) → on peut négliger les variations de \vec{B} avec \vec{r} .

Effet identique à celui déjà connu pour des atomes neutres interagissant avec un champ de radiofréquence. Interprétation donnée dans le cours I

A déjà été étudié en détail sur le plan théorique et expérimental

S. Haroche thèse Paris 1971

Ann. de Phys. 6, 189 et 327 (1971)



Sous l'effet du champ \vec{B} de l'onde, le moment magnétique oscille angulairement en gardant une longueur constante

L'interaction moyenne avec un champ statique \vec{B}_0 est diminuée, ce qui correspond à un moment magnétique "effectif" réduit

Interprétation physique du terme (d)

T-17

Variation du moment magnétique de spin due à l'"abourdissement" de l'électron sous l'effet de sa vibration

Remplacement dans $\frac{e\hbar}{2m}$ de m par $m + \frac{E_V^N}{c^2}$

$$-\frac{e\hbar}{2(m + \frac{E_V^N}{c^2})} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 =$$

$$-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 + \frac{E_V^N}{mc^2} \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 + \dots$$

Le 2^{ème} terme dans le développement en puissances de $\frac{E_V^N}{mc^2}$ n'est autre que le terme (d)

Terme qui n'existe que parce que l'électron est chargé et vibre. N'existe pas pour des atomes neutres. Il en est de même des 2 derniers termes (14)(00) et (12)(11)

Interprétation physique du terme (14)(00)

T-18

1 dans (14) → le couplage de e avec le champ \vec{E} de l'onde intervient

4 dans (14) → le couplage de $\vec{\sigma}$ avec un champ magnétique motionnel intervient. Enfin \vec{B}_0 figure dans $\vec{\Pi}_0$.

D'où l'interprétation suivante.

L'électron vibre dans le champ \vec{E} de l'onde incidente. Le champ statique \vec{B}_0 déforme légèrement le mouvement de vibration, de sorte que la vitesse \vec{v} de e a une partie indépendante de \vec{B}_0 et une partie linéaire en \vec{B}_0 (voir T2 et T5 cours V).

Comme \vec{v} et \vec{E} oscillent à la même fréquence, le champ motionnel $-\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}$ a une composante constante à laquelle le moment magnétique de spin se couple pour donner une interaction

$$-\frac{1}{2} \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \left(-\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \right) \quad \left(\frac{1}{2} : \text{précession de Thomas} \right)$$

le terme de \vec{v} , indépendant de \vec{B}_0 , redonne (b). Le terme linéaire en \vec{B}_0 de \vec{v} redonne exactement (14)(00)

Interprétation physique du terme (12)(11) [T-19]

(12) → il faut faire intervenir à la fois l'interaction de la charge et du spin avec les champs \vec{E} et \vec{B} de l'onde plane

Première 1 dans (11) → B_0 joue un rôle
Deuxième 1 dans (11) → il ne faut pas faire l'approximation dipolaire électrique

Soit l'effet de \vec{B}_0 , le mouvement de vibration de la charge acquiert une composante $\delta\vec{p}(t)$ parallèle à $\vec{E} \times \vec{B}_0$ (voir T5 page v2), et qui peut avoir une composante non nulle le long de \vec{k} .

En vibrant le long de \vec{k} , l'électron peut donc "sentir" la dépendance spatiale en $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ du champ \vec{B} de l'onde plane

Comme l'électron vibre à la même fréquence que ce champ \vec{B} , il peut "rectifier" ce champ

[T-20] Plus précisément, considérons le développement de $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ en puissances de $\vec{k}\cdot\vec{r}$. Terme d'ordre 1

$$\delta\vec{B} = -\frac{B\omega}{c\sqrt{2}} (\vec{k}\cdot\vec{r}) [e^{-i\omega t} (\vec{k}\times\vec{E}) + h.c.]$$

Remplaçons B par $\frac{E}{c}$ et \vec{r} par $\delta\vec{p}(t)$, vibration de e dans \vec{E} et \vec{B}_0 et qui a une projection non nulle sur \vec{k}

$$\delta\vec{p}(t) = \frac{e^2 E}{m^2 \omega^2 \sqrt{2}} [(\vec{E}\times\vec{B}_0) e^{-i\omega t} + h.c.]$$

Les facteurs oscillants en $e^{\pm i\omega t}$ de $\delta\vec{B}$ et $\delta\vec{p}$ peuvent se compenser pour donner un champ magnétique "rectifié"

$$(\vec{B})_{\text{rect}} = -\frac{e^2 E^2}{2m^2 c^2 \omega^2} \{(\vec{k}\times\vec{E})(\vec{k}\times\vec{E}^*)\cdot\vec{B}_0 + h.c.\}$$

auquel peut se coupler le moment magnétique de spin en donnant naissance à une énergie d'interaction

$$- \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma}\cdot(\vec{B})_{\text{rect}}$$

On retrouve ainsi exactement (12)(11)

Conclusions en ce qui concerne les corrections radiatives stimulées de - pendant du spin [T-21]

(1) Tous les effets stimulés liés au spin sont en $\frac{e^2 N}{E_V} \frac{E_L}{mc^2}$. Il fallait donc bien partir d'un hamiltonien correct à l'ordre $\frac{1}{c^2}$ inclus, sans approximation dipolaire électrique, pour être sûr de les obtenir tous.

(2) Il n'est pas suffisant de considérer le mouvement d'un moment magnétique couplé au champ \vec{B} de l'onde plane.

L'électron est à la fois une charge et un moment magnétique qui vibrent tous les 2. La vibration de la charge modifie les couplages du spin : apparition de champs magnétiques motionnels, rectification du champ \vec{B} de l'onde plane, allourdissement de e et modification du magnéton de Bohr
Grande richesse d'effets physiques

(3) Tous les effets stimulés liés au spin peuvent, comme les autres, être interprétés quantitativement de manière semi-classique [T22]

(4) Compensation entre 2 termes importants en $E_V \frac{\hbar\omega}{mc^2}$ (Termes (b) et (22)(00))

Compensation due à la relation $B = \frac{E}{c}$ entre les champs E et B d'une onde plane. Possibilité de non-compensation dans d'autres configurations (cavités, guides d'ondes...)

(5) Tous les effets stimulés trouvés font intervenir le champ magnétique statique \vec{B}_0 et non le champ électrique statique \vec{E}_0 . Raisons de ce manque de couplage entre $\vec{\sigma}$ et \vec{E}_0 (à l'ordre étudié ici)

(i) \vec{E}_0 n'est pas couplé directement à $\vec{\sigma}$ (le couplage spin-orbite entre $\vec{\sigma}$ et le champ motionnel $-\frac{1}{c^2} \vec{v}\times\vec{E}_0$ est déjà contenu dans H_0 et ne fait pas intervenir E_V^N).

(ii) \vec{E}_0 ne modifie pas le mouvement de vibration de e .

Buts de ce cours

- Calculer les corrections radiatives spontanées à l'ordre $1/c^2$ inclus, en particulier celles faisant intervenir le spin. Compléter ainsi le cours V.
- Interpréter physiquement les résultats et répondre aux questions posées dans le cours I, en ce qui concerne l'origine et le signe de $g-2$.

Plan

D - Etude des effets spontanés

- 1 - Effets spontanés dus aux fluctuations du vide T 1 à T 10
- 2 - Effets spontanés dus à la réaction de rayonnement T 11 à T 15
- 3 - Récapitulation et conclusion T 16 à T 17
- 4 - Intégration sur ω T 18 à T 19

E - Aperçu sur l'effet des modes relativistes ($\hbar\omega \gtrsim mc^2$) T 20 à T 22

Etude des corrections radiatives spontanées T 1

$$H_{\text{eff}}(\text{corr. radiatives}) = \underbrace{N(R+S)}_{\text{Effets stimulés}} + \underbrace{R}_{\text{Effets spontanés}}$$

$$H_{\text{eff}}(\text{corr. rad. Spontanées}) = \underbrace{\frac{1}{2}(R+S)}_{H_{\text{fe}}} + \underbrace{\frac{1}{2}(R-S)}_{H_{\text{rr}}}$$

H_{fe} : effets spontanés dus aux fluctuations du vide. Même interprétation que pour les effets stimulés au remplacement près de E_r^N par E_r^0 (idem que pour cours IV et V)

H_{rr} : effets spontanés dus à la réaction de rayonnement

- Moyenne angulaire : effet d'une "couronne de modes"

$$\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{e}} \int d^3k \quad (\text{On peut donc prendre } \vec{e} \text{ réel})$$

- Intégration sur ω entre ω_m et ω_M

Nouveaux termes apparaissant dans T-2

H_{fe} (par rapport à ceux du cours V)

2 nouveaux termes

(i) Terme
$$- \frac{E_r^0}{mc^2} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$$

Interprétation physique : variation de l'énergie cinétique due à la renormalisation de la masse δm_{fv} associé aux fluctuations du vide

$$\delta m_{\text{fv}} = \frac{E_r^0}{c^2}$$

$$\begin{aligned} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2(m+\delta m_{\text{fv}})} &= \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} - \frac{\delta m_{\text{fv}}}{m} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} + \dots \\ &= \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} - \frac{E_r^0}{mc^2} \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} + \dots \end{aligned}$$

Existence de ce terme déjà soupçonné plus haut (voir T 22 p. V-6)

(ii) Termes dépendant du spin

$$H_{\text{fv}}(\text{spin}) = \frac{E_r^0}{mc^2} \frac{e\hbar}{2m} \left[2\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 - (\vec{K} \cdot \vec{\sigma})(\vec{K} \cdot \vec{B}_0) \right]$$

T-3

Moyenne angulaire des termes dépendant du spin de H_{fv}

En utilisant $\langle K_i K_j \rangle_{ang} = \frac{1}{3} \delta_{ij} = \langle E_i E_j \rangle_{ang}$
 on obtient $\langle H_{fv}(\text{spin}) \rangle_{ang} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2}$

Contribution des différents termes de $H_{fv}(\text{spin})$ au facteur $5/3$

- (22)(10) $\rightarrow + \frac{2}{3}$
- (d) $\rightarrow + 1$
- (14)(00) $\rightarrow - \frac{2}{3}$
- (12)(11) $\rightarrow + \frac{2}{3}$

Le signe global est le même que celui des term. (22)(10) associé au spin seul.

Comme $\frac{5}{3} > \frac{2}{3}$, l'effet des 3 autres termes (termes "croisés" charge-spin) augmente l'effet du terme associé au spin seul.

T-4

Effet des fluctuations du vide (de fréquence ω) sur le spin

En regroupant $\langle H_{fv}(\text{spin}) \rangle_{ang}$ avec le terme $-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$ de l'hamiltonien électronique, on obtient :

$$-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 + \langle H_{fv}(\text{spin}) \rangle_{ang} = -\frac{e\hbar}{2m} \left(1 - \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2}\right) \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$$

Tout se passe donc comme si le moment magnétique de spin de l'électron était diminué par un facteur $1 - \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2}$

T-5

Conclusion sur l'effet des fluctuations du vide sur le moment magnétique de spin

L'image d'un moment magnétique vibrant angulairement sous l'effet du champ B d'une onde plane laisse prévoir une réduction du moment magnétique effectif de spin.

On pourrait espérer que le couplage entre la vibration de la charge et celle du spin renverserait le signe de cette correction. Il n'en est rien. Le calcul précis des termes "croisés" charge spin montre qu'ils ne font qu'empirer la situation. Le facteur de réduction du moment magnétique de spin passe de $(1 - \frac{2}{3} \frac{E_v^0}{mc^2})$ à $(1 - \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2})$.

T-6

Comparaison de l'effet des F.V. sur le spin et les variables orbitales

Effet sur les variables orbitales

$$\frac{\vec{\Pi}_0^2}{2m} \rightarrow \frac{\vec{\Pi}_0^2}{2m} \left(1 - \frac{E_v^0}{mc^2}\right)$$

Effet sur les variables de spin

$$-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \rightarrow -\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \left(1 - \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2}\right)$$

- (i) L'effet n'est pas le même. On ne peut pas tout décrire par une simple renormalisation de la masse qui reviendrait à changer m en $m + \frac{E_v^0}{c^2}$ à la fois dans $\frac{\vec{\Pi}_0^2}{2m}$ et $-\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$ [c'est ce que fait le terme (d) dans $H_{fv}(\text{spin})$ mais il n'est pas le seul !]

(ii) l'effet des fluctuations du vide est plus important sur le spin que sur l'orbitale.

Cas particulier d'un electron dans un champ magnetique uniforme \vec{B}_0

T-7 T-8

Diagramme d'energie pour $g=2$

X-3

Négligeons tout d'abord les corrections radiatives

① Niveaux d'energie de $\frac{\vec{\pi}_0^2}{2m}$

$$\vec{\pi}_0 = \vec{p} - e\vec{A}_0(\vec{r}) \quad \vec{A}_0(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{B}_0 \times \vec{r}$$

"Niveaux de Landau" repérés par un entier $n = 0, 1, 2, \dots$, d'energie $n\hbar\omega_c$

$$\omega_c = \frac{|e|\hbar B_0}{m} : \text{Fréquence cyclotron}$$

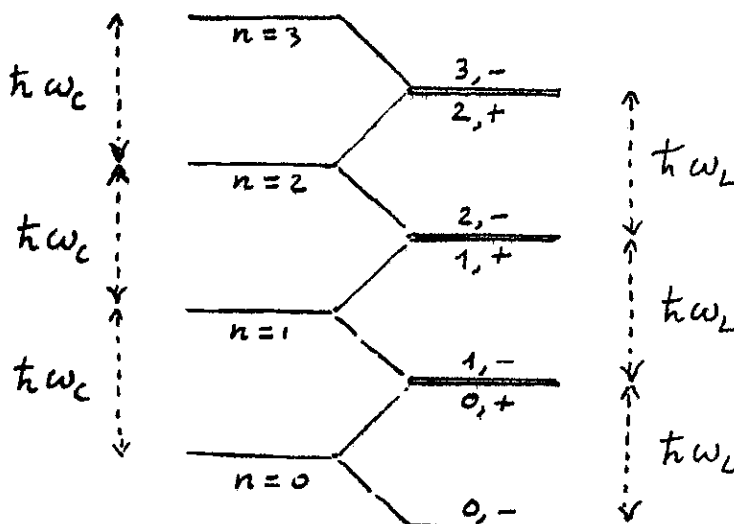
② Niveaux d'energie de $-\frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0$

2 niveaux de spin $|+\rangle$ et $|-\rangle$ séparés par $\hbar\omega_L$

$$\omega_L = g \frac{|e|\hbar B_0}{2m} : \text{Fréquence de Larmor}$$

$$g=2 \Rightarrow \omega_L = \omega_c$$

(Sans corrections radiatives)



Niveau fondamental $0, -$ non dégénéré

Niveaux excités doublement dégénérés ($|n, +\rangle$ et $|n+1, -\rangle$ ont même énergie) si $g=2$, c-à-d si $\omega_c = \omega_L$

Effet des fluctuations du vide (de fréquence ω) sur le diagramme précédent

T-9

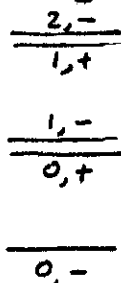
Conclusions : impossibilité d'une image "à la Welton" pour comprendre le signe de $g-2$

T-10

$$\omega_c \rightarrow \omega_c \left(1 - \frac{E_v^0}{mc^2}\right) \quad \omega_L \rightarrow \omega_L \left(1 - \frac{5}{3} \frac{E_v^0}{mc^2}\right)$$

ω_c et ω_L sont toutes deux diminuées mais ω_L l'est plus que ω_c

↳ Dégénérescence levée entre $|n, +\rangle$ et $|n+1, -\rangle$, $|n+1, -\rangle$ étant au dessus de $|n, +\rangle$



Résultat expérimental

Comme $g-2 > 0$, ω_L est plus grand que ω_c , et la disposition précédente n'est pas la bonne. C'est $|n, +\rangle$ qui est au dessus de $|n+1, -\rangle$ et non l'inverse.

image "à la Welton" pour comprendre le signe de $g-2$.

Il est impossible, au moins en ce qui concerne les modes faiblement relativistes ($\hbar\omega \ll mc^2$) de comprendre le signe positif de $g-2$, c-à-d encore le fait que $\omega_L > \omega_c$, en considérant la vibration de la charge et du spin de l'électron sans l'effet des fluctuations du vide.

A ce stade, 2 possibilités

- (i) C'est la réaction de rayonnement qui rétablit la situation.
- (ii) Elle n'y arrive pas et cela veut dire alors que l'origine de l'effet est à rechercher dans l'interaction avec les modes relativistes ($\hbar\omega \gtrsim mc^2$).

Effets spontanés associés à la réaction de rayonnement

T-11

Résultats du calcul

$$H_{rr} = \frac{E_v^0}{v} \frac{mc^2}{\hbar\omega} - \frac{E_v^0}{v} \frac{2(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)^2}{m\hbar\omega}$$

$$= \frac{E_v^0 \hbar\omega}{2mc^2} - \frac{E_v^0 \hbar\omega}{2mc^2} - \frac{E_v^0}{v} \frac{2(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)(\vec{k} \cdot \vec{\pi}_0)(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)}{\hbar\omega mc^2}$$

1^{ère} ligne : Termes déjà obtenus au cours V

$$\frac{E_v^0}{v} \frac{mc^2}{\hbar\omega} : \text{self énergie de Coulombs (V Coulombs)}$$

$$\frac{E_v^0}{v} \frac{2(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)^2}{m\hbar\omega} : \text{terme (11)(00)}$$

2^{ème} ligne : nouveaux termes

$$- \frac{E_v^0}{v} \frac{\hbar\omega}{2mc^2} : \text{correction de self-énergie due aux effets à N particules}$$

$$- \frac{E_v^0}{v} \frac{\hbar\omega}{2mc^2} : \text{terme (22)(00)}$$

$$- \frac{E_v^0}{v} \frac{2(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)(\vec{k} \cdot \vec{\pi}_0)(\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0)}{\hbar\omega mc^2} : \text{terme (11)(11)}$$

Interprétation physique du terme (22)(00)

X-4

Même interprétation que le terme (11)(00) à part que l'interaction ① de la charge avec \vec{E} est remplacé par l'interaction ② du spin avec \vec{B} .

Terme (11)(00) : la charge est la source d'un champ avec laquelle elle interagit. Elle interagit avec son champ propre : réaction de rayonnement

Terme (22)(00) : le spin est la source d'un champ avec lequel il interagit. Interaction du spin avec son champ propre : réaction de rayonnement du spin.

Le terme apparaît dans le calcul sous la forme

$$- \frac{1}{\hbar\omega} \left[\left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega L^3} \right)^{1/2} \right]^2 \left(\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot (\vec{k} \times \vec{E}) \right)^2$$

Or, le carré de la projection de $\vec{\sigma}$ sur un axe quelconque vaut 1 ($\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$) c'est la raison pour laquelle le terme (22)(00) ne contient plus $\vec{\sigma}$.

Interprétation physique du terme (11)(11)

T-13

Correction relativiste au terme (11)(00)

L'électron se déplace à la vitesse $\frac{\vec{\pi}_0}{m}$ dans l'onde plane. Dans son référentiel, la fréquence de cette onde est déplacée par effet Doppler et devient

$$\omega \left[1 - \frac{\vec{k} \cdot \vec{\pi}_0}{mc} \right]$$

Quand on remplace ω par cette valeur dans (11)(00) et qu'on développe en puissances de $\frac{v}{c}$, le terme d'ordre 1 redonne (11)(11)

la moyenne angulaire de ce terme est nulle.

Moyenne angulaire de H_{rr}

T-14

$$\langle H_{rr} \rangle_{\text{ang}} = \frac{E_v^0}{v} \frac{mc^2}{\hbar\omega} - \frac{4}{3} \frac{E_v^0}{v} \frac{\vec{\pi}_0^2}{\hbar\omega 2m} - \frac{E_v^0}{v} \frac{\hbar\omega}{mc^2}$$

$$\text{Si l'on pose } \delta m_r = \frac{4}{3} \frac{E_v^0}{v} \frac{1}{\hbar\omega} m$$

le 2^{ème} terme apparaît comme une correction à l'énergie cinétique due à la renormalisation de la masse δm_r associé à la réaction de rayonnement.

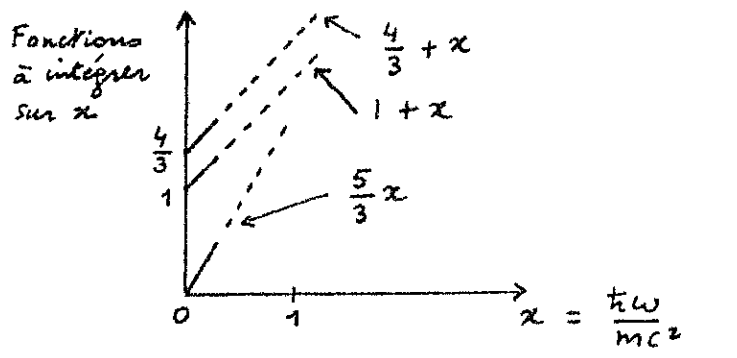
Le fait que le facteur $\frac{4}{3}$ n'apparaît pas dans le 1^{er} terme provient du caractère non covariant d'une "couronne de modes"

Le dernier terme corrige le premier (correction en $(\frac{\hbar\omega}{mc^2})^2$). La correction de masse correspondante δm_r est en $1/c^4$ et n'a pas de conséquences dynamiques à cet ordre du calcul (correction à $\vec{\pi}_0^2/2m$ en $1/c^4$).

Résultat du calcul pour un electron dans un champ B_0

$$H_{\text{eff}}(\text{spontané}) = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} (1+x+\dots) dx \right] + \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} \left[1 - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} \left(\frac{4}{3} + x+\dots \right) dx \right] - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \left[1 - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} \left(\frac{5x}{3} + \dots \right) dx \right]$$

Dans les intégrales sur x , les termes constants sont ceux obtenus dans le calcul à l'ordre 0 en $1/c$ du cours V, les termes en x , les corrections relativistes calculées dans les cours IX et X.



Aperçu sur l'effet des modes relativistes ($\hbar\omega \gtrsim mc^2$)

$$H_{\text{eff}}(\text{spontané}) = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} E(x) dx \right] + \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} \left[1 - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} \eta(x) dx \right] - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \left[1 - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} \zeta(x) dx \right]$$

Un calcul relativiste complet donne de cette année ont consisté à rechercher les développements de $E(x)$, $\eta(x)$, $\zeta(x)$ au voisinage de $x=0$.

Le calcul complet donne l'expression de ces fonctions $\forall x$. Comme les divergences sont toutes logarithmiques, on peut prendre $x_M \gg 1$ (c-à-d $\hbar\omega_M \gg mc^2$), tout en gardant pour les intégrales sur x (multipliées par $\frac{\alpha}{\pi} \ll 1$) des valeurs très petites devant 1.

Résultat du calcul complet

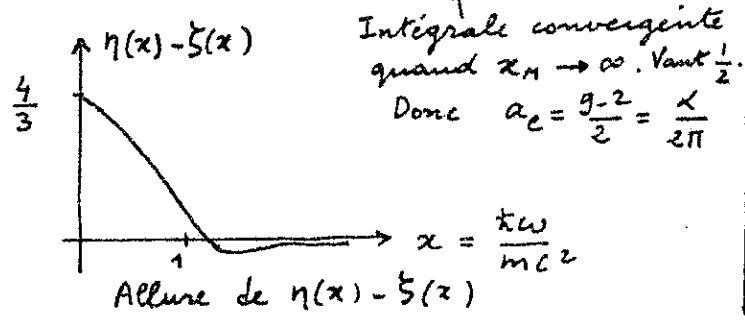
On trouve que $\int_0^{x_M} E(x) dx$ et $\int_0^{x_M} \eta(x) dx$ ont la même dépendance en $\log x_M$. Posons $m_{\text{exp}} = m \left(1 + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} E(x) dx \right) = m \left(1 + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} \eta(x) dx \right)$

On peut alors écrire

$$H_{\text{eff}}(\text{spontané}) = m_{\text{exp}} c^2 + \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m_{\text{exp}}} - \frac{e\hbar}{2m_{\text{exp}}} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0 \left[1 + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} [\eta(x) - \zeta(x)] dx \right]$$

Quand on réexprime H_{eff} en fonction de m_{exp} , on trouve que

$$g = 2 [1 + a_e] \text{ où l'anomalie } a_e \text{ vaut } a_e = \frac{g-2}{2} = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{x_M} [\eta(x) - \zeta(x)] dx$$



Conclusion finale sur g-2

La prise en compte des modes $\hbar\omega \gtrsim mc^2$ ne change pas la conclusion obtenue plus haut.

La physique de g-2, en particulier son signe, ne nécessite pas de faire appel aux modes relativistes. Ce sont essentiellement les modes $\hbar\omega \leq mc^2$ qui contribuent à g-2 (voir figure T-21)

L'effet essentiel pour g-2 est le ralentissement de la fréquence cyclotron dû à la réaction de rayonnement. Les fluctuations du vide ont un effet beaucoup plus petit et de signe opposé.

Par contre, pour le déplacement de Lamb, l'écart entre les états $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$ est essentiellement dû aux fluctuations du vide et au moyennage du potentiel coulombien qu'elles font effectuer à l'électron.

Références générales : données à la fin du cours I