

Plan

- ① Retour à un modèle d'atome plus réaliste (T1)
- ② Calcul de la vitesse de variation d'une observable atomique quelconque  
Approximations effectuées (T2 à T5)
- ③ Calcul du terme en  $k_M$   
Renormalisation de la masse due à la réaction de rayonnement (T6 à T9)
- ④ Déplacements de niveaux dus aux fluctuations du vide  
Calcul et interprétation physique (T10 à T17)
- ⑤ Conclusion générale pour les déplacements de niveaux (T18)
- ⑥ Transitions radiatives entre niveaux (T19 à T20)

T1 Retour à un modèle d'atome plus réaliste

Hamiltonien

$$H = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2m_0}}_{H_A} + \underbrace{V(\vec{r}) + \frac{k_M^3}{18\epsilon_0\pi^2} D_j D_j}_{\text{self-énergie atomique}} + \underbrace{H_R - D_j E_j(\vec{0})}_{\text{Interaction } V}$$

Compte à  $k_M$

Écriture de  $V$  sous forme symétrique

(Pour séparer clairement les effets des fluctuations du vide et ceux de la réaction de rayonnement)

$$V = -\frac{1}{2} D_j E_j(\vec{0}) - \frac{1}{2} E_j(\vec{0}) D_j$$

Évolution d'une observable atomique quelconque  $G_A$

$$\frac{d}{dt} G_A = \frac{1}{i\hbar} [G_A, H]$$

T2 Calcul de  $\frac{1}{i\hbar} [G_A, H]$

①  $\frac{1}{i\hbar} [G_A, H_A]$  Evolution purement atomique

②  $\frac{1}{i\hbar} [G_A, \frac{k_M^3}{18\epsilon_0\pi^2} D_j D_j] =$   
 $\frac{1}{i\hbar} \frac{k_M^3}{18\epsilon_0\pi^2} [G_A, D_j D_j] = [G_A, D_j] D_j + D_j [G_A, D_j]$

③  $\frac{1}{i\hbar} [G_A, V] = -\frac{1}{2i\hbar} \{ [G_A, D_j] E_j(\vec{0}) + E_j(\vec{0}) [G_A, D_j] \}$

En regroupant tout, on obtient

$$\frac{d}{dt} G_A = \frac{1}{i\hbar} [G_A, H_A] + \frac{1}{2i\hbar} \{ [G_A, D_j] (C D_j - E_j(\vec{0})) + (C D_j - E_j(\vec{0})) [G_A, D_j] \}$$

avec  $C = \frac{k_M^3}{9\epsilon_0\pi^2}$

T3

Rappels sur  $E_j(\vec{0})$ 

(Champ créé par le dipôle

 $D_j = e r_j$  à son propre emplacement) $E_j(\vec{0}) = E_{0j}(\vec{0})$  ← Champ du vide

$$+ \underbrace{\frac{k_M^3}{9\epsilon_0 n^2} D_j - \frac{k_M}{3n^2 \epsilon_0 c^2} \ddot{D}_j + \frac{1}{6n\epsilon_0 c^3} \dddot{D}_j}_C$$

← Champ des sources

On remplace, dans  $\frac{d}{dt} G_A$ ,  $E_j(\vec{0})$  par l'expression précédente

Comme, dans  $\frac{dG_A}{dt}$ , apparaît  $C D_j - E_j(\vec{0})$ , on voit que l'ordre symétrique choisi pour  $V$  fait disparaître la divergence en  $k_M^3$  dès le début.

Autre avantage de l'ordre symétrique.

T5

Expression de  $r_j$  en fonction des  $S_{\alpha\beta}$ Les  $S_{\alpha\beta}$  forment un ensemble orthonormé complet d'opérateurs

$$r_j = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\alpha\rangle \langle \alpha| r_j |\beta\rangle \langle \beta|$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} r_{\alpha\beta}^j |\alpha\rangle \langle \beta| = \sum_{\alpha, \beta} r_{\alpha\beta}^j S_{\alpha\beta}$$

Approximation pour le calcul de  $\ddot{r}_j$ ,  $\ddot{\ddot{r}}_j$  $\ddot{r}_j$  et  $\ddot{\ddot{r}}_j$  apparaissent dans des termes déjà en  $e^2$ On peut donc négliger l'interaction avec le rayonnement pour calculer  $\ddot{r}_j$  et  $\ddot{\ddot{r}}_j$  et utiliser

$$\dot{S}_{\alpha\beta} = i\omega_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} \quad \ddot{S}_{\alpha\beta} = -\omega_{\alpha\beta}^2 S_{\alpha\beta} \quad \dots$$

de sorte que

$$\ddot{r}_j = - \sum_{\alpha, \beta} \omega_{\alpha\beta}^2 r_{\alpha\beta}^j S_{\alpha\beta}$$

$$\ddot{\ddot{r}}_j = - \sum_{\alpha, \beta} i\omega_{\alpha\beta}^3 r_{\alpha\beta}^j S_{\alpha\beta}$$

T4

X1-2

Finalement

$$\frac{d}{dt} G_A = \frac{1}{i\hbar} [G_A, H_A]$$

$$- \frac{e}{2i\hbar} \left\{ [G_A, r_j] E_{0j}(\vec{0}) + E_{0j}(\vec{0}) [G_A, r_j] \right\}$$

$$+ \frac{1}{2i\hbar} \frac{e^2 k_M}{3n^2 \epsilon_0 c^2} \left\{ [G_A, r_j] \ddot{r}_j + \ddot{r}_j [G_A, r_j] \right\}$$

$$- \frac{1}{2i\hbar} \frac{e^2}{6n\epsilon_0 c^3} \left\{ [G_A, r_j] \ddot{\ddot{r}}_j + \ddot{\ddot{r}}_j [G_A, r_j] \right\}$$

Opérateurs  $G_A$  étudiés

$$H_A |\varphi_\alpha\rangle = E_\alpha |\varphi_\alpha\rangle$$

$$G_A = S_{\alpha\beta} = |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\beta|$$

$$\frac{1}{i\hbar} [S_{\alpha\beta}, H_A] = -\frac{i}{\hbar} (E_\beta - E_\alpha) S_{\alpha\beta}$$

$$= i\omega_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}$$

L'évolution non-perturbée de  $S_{\alpha\beta}$  se fait à la fréquence de Bohr

$$\omega_{\alpha\beta} = (E_\alpha - E_\beta)/\hbar$$

T6

Calcul du terme en  $k_M$ 

Contribue à  $\frac{dG_A}{dt}$  par

$$\frac{1}{2i\hbar} \frac{e^2 k_M}{3n^2 \epsilon_0 c^2} \left\{ [G_A, r_j] \ddot{r}_j + \ddot{r}_j [G_A, r_j] \right\}$$

On prend  $G_A = S_{\lambda\mu}$

Approximations

① Perturbative

$$\ddot{r}_j = - \sum_{\alpha, \beta} \omega_{\alpha\beta}^2 r_{\alpha\beta}^j S_{\alpha\beta}$$

② Séculaire

Dans  $\frac{d}{dt} S_{\lambda\mu}$ , on ne garde que les termes évoluant à la même fréquence non-perturbée  $\omega_{\lambda\mu}$  que  $S_{\lambda\mu}$ .

T7)

Un intermédiaire de calcul commode

Comment passer de  $r$  à  $p$  et réciproquement ?

$$\text{De } [r_j, H_A] = i\hbar \frac{\partial H_A}{\partial p_j} = i\hbar \frac{p_j}{m_0}$$

on déduit

$$r_{\alpha\beta}^j (E_\beta - E_\alpha) = \frac{i\hbar}{m_0} p_{\alpha\beta}^j$$

$$\boxed{\omega_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta}^j = \frac{i}{m_0} p_{\alpha\beta}^j}$$

Dans le terme en  $k_m$ , figurent 2 éléments de matrice de  $r$  et une fréquence de Bohr au carré

On peut donc faire apparaître (grâce en plus à l'approximation séculaire) un élément de matrice de  $p$  au carré

XI-3

T8)

Résultats du calcul

L'effet du terme en  $k_m$  est équivalent à celui d'un hamiltonien supplémentaire

$$\delta H = - \frac{\delta m}{2m_0^2} (\vec{p}^2)_{\text{drag}}$$

où

$$\delta m c^2 = \frac{e^2 k_m}{3\pi^2 \epsilon_0}$$

$(\vec{p}^2)_{\text{drag}}$  signifie qu'on ne garde de  $\vec{p}^2$  que les éléments de matrice entre états propres de  $H_A$  de même énergie

Par ailleurs, on peut écrire

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}^2}{2(m_0 + \delta m)} &= \frac{\vec{p}^2}{2m_0} \frac{1}{1 + \frac{\delta m}{m_0}} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{\delta m}{2m_0^2} \vec{p}^2 + \dots \end{aligned}$$

T9)

Conclusion pour le terme en  $k_m$ 

Son effet est équivalent à celui d'un changement de la masse  $m_0$  de l'électron

$$m_0 \rightarrow m = m_0 + \delta m$$

(la correction en  $\delta m$  étant calculée ici à l'ordre 1 en  $e^2$ )

Comme on trouve que le terme en  $\vec{v}$  ne crée pas de déplacement, on en conclut que les déplacements de niveaux produits par la réaction de rayonnement s'interprètent entièrement par une renormalisation de la masse

La réaction de rayonnement seule ne permet donc pas de comprendre le Lamb-shift

T10)

Effet des fluctuations du vide

Contribue à  $\frac{dG_A}{dt}$  par

$$-\frac{e}{2i\hbar} \left\{ [G_A, r_j] E_{0j}(\vec{0}) + E_{0j}(\vec{0}) [G_A, r_j] \right\}$$

$$\text{Posons } E_{0j}(\vec{0}) = E_{0j}^{(+)}(\vec{0}) + E_{0j}^{(-)}(\vec{0})$$

Il faut faire passer les  $E_{0j}^{(+)}$  à droite, les  $E_{0j}^{(-)}$  à gauche pour rétablir l'ordre normal, commode pour faire les calculs de moyennes

Il faut donc connaître les commutateurs de  $E_0^{(\pm)}$  à un instant  $t$  avec une grandeur atomique au même instant  $t$

Principe du calcul identique à celui de l'atome à 2 niveaux

On avait posé

$$D = d(S_+ + S_-) = d(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)$$

T11)

On pose ici

$$D_j = \sum_{\alpha\beta} \underbrace{d_{\alpha\beta}^j}_{e r_{\alpha\beta}^j} |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\beta|$$

A la sommation sur  $\alpha$  et  $\beta$  près, la suite des calculs est la même. On trouve

$$[G_A(t), E_{oj}^{(+)}(\vec{0}, t)] =$$

$$- \sum_{\alpha\beta} \frac{i\hbar}{d_{\alpha\beta}^j} [G_A(t), S_{\alpha\beta}(t)] \left( \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\rightarrow\beta} + i \delta_{\alpha\rightarrow\beta} \right)$$

avec

$$\begin{cases} \gamma_{\alpha\rightarrow\beta} = \frac{1}{\hbar} \frac{e^2 \sum_i |r_{\alpha\beta}^i|^2}{3\pi\epsilon_0 c^3} \omega_{\alpha\beta}^3 \theta(\omega_{\alpha\beta}) \\ \delta_{\alpha\rightarrow\beta} = \frac{1}{\hbar} \frac{e^2 \sum_i |r_{\alpha\beta}^i|^2}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \mathcal{P} \int_0^{\omega_M} \frac{\omega^3 d\omega}{\omega_{\alpha\beta} - \omega} \end{cases}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

T13) Effet des fluctuations du vide

Résultats du calcul pour les déplacements de niveaux

On trouve que le déplacement  $\Delta_\alpha$  de  $|\varphi_\alpha\rangle$  du aux fluctuations du vide est la somme sur  $\beta$  de la partie impaire en  $\omega_{\alpha\beta}$  de  $\delta_{\alpha\rightarrow\beta}$

$$(\Delta_\alpha)_{FV} = - \sum_{\beta} \frac{e^2 \sum_i |r_{\alpha\beta}^i|^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \times$$

$$\left( \omega_{\alpha\beta}^3 \log \frac{\omega_M - \omega_{\alpha\beta}}{|\omega_{\alpha\beta}|} + \omega_{\alpha\beta} \frac{\omega_M^2}{2} \right)$$

Terme en  $\omega_M^2$  et terme en  $\log \omega_M$

Approximation pour le terme en  $\log \omega_M$

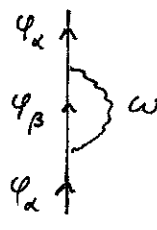
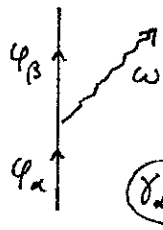
$$\log \frac{\omega_M - \omega_{\alpha\beta}}{|\omega_{\alpha\beta}|} \rightarrow \log \frac{\omega_M}{\bar{\omega}}$$

$\bar{\omega}$  : fréquence atomique moyenne

T12)

(X1-4)

Interprétation de  $\gamma$  et  $\delta$



$\gamma_{\alpha\rightarrow\beta}$  : Taux d'émission spontanée  $|\varphi_\alpha\rangle \rightarrow |\varphi_\beta\rangle$  (on doit avoir  $E_\alpha > E_\beta$ )

$\delta_{\alpha\rightarrow\beta}$  : Déplacement radiatif de  $|\varphi_\alpha\rangle$  du à une transition virtuelle vers  $|\varphi_\beta\rangle$

Calcul explicite de la partie principale apparaissant dans  $\delta_{\alpha\rightarrow\beta}$

On trouve

$$\delta_{\alpha\rightarrow\beta} = - \frac{1}{\hbar} \frac{e^2 \sum_i |r_{\alpha\beta}^i|^2}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \times$$

$$\left[ \omega_{\alpha\beta}^3 \log \frac{\omega_M - \omega_{\alpha\beta}}{|\omega_{\alpha\beta}|} + \omega_{\alpha\beta}^2 \omega_M + \omega_{\alpha\beta} \frac{\omega_M^2}{2} + \frac{\omega_M^3}{3} \right]$$

T14)

Déplacement en  $\omega_M^2$

Grandes lignes du calcul

- Dans le terme en  $\omega_M^2$  apparaît  $|r_{\alpha\beta}^i|^2 \omega_{\alpha\beta}$  qu'on peut transformer en  $\frac{i}{2m_0} (r_{\alpha\beta}^i p_{\beta\alpha}^i - p_{\alpha\beta}^i r_{\beta\alpha}^i)$

- la somme sur  $\beta$  fait apparaître le commutateur

$$[r^i, p^i]_{\alpha\alpha} = i\hbar$$

- Finalement, on trouve que le déplacement en  $\omega_M^2$  est le même pour tous les niveaux et vaut

$$\Delta_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega_M^2}{2m_0\pi c^3}$$

Il ne peut pas expliquer le Lamb-shift.

T15]

Interprétation physique

Sous l'effet des fluctuations du vide, l'électron vibre.

$\Delta_1$  représente l'énergie cinétique de vibration correspondante de l'électron.

Calcul semi-classique

$$m_0 \ddot{x} = e E_\omega e^{i\omega t}$$

$$\frac{1}{2} m_0 \dot{x}^2 = \frac{e^2 E_\omega^2}{2 m_0 \omega^2}$$

On calcule  $E_\omega^2$  pour le mode  $\omega$  en prenant la contribution du mode  $\omega$  à  $\langle 0 | E^2 | 0 \rangle$ .

On somme sur  $\omega$  de 0 à  $\omega_M$ . On retrouve ainsi  $\Delta_1$ .

$\Delta_1 / c^2$  représente la renormalisation de la masse due aux fluctuations du vide. La correction à l'énergie cinétique apparaîtrait à un ordre supérieur du calcul.

T17]

Interprétation physique

Sous l'effet des fluctuations du vide, l'électron vibre et moyenne le potentiel  $V(r)$  sur une distance correspondant à l'amplitude de vibration.

$(\Delta_2)_\alpha$  coïncide avec le résultat du calcul semi-classique de Welton.

Lorsque  $V(r)$  est un potentiel coulombien (cas de l'atome H)

$$\Delta V(r) \sim \delta(r^2)$$

Cet effet affecte uniquement les électrons  $s$  pour lesquels  $|\psi(\vec{0})|^2 \neq 0$ .

On trouve bien que l'état  $2S_{1/2}$  est déplacé vers le haut par rapport à l'état  $2P_{1/2}$ .

Le Lamb-shift est donc bien due essentiellement aux fluctuations du vide.

T16]

Déplacement en  $\log \omega_M$ 

XI.5

Grandes lignes du calcul

- Dans le terme en  $\log \omega_M$  apparaît  $|r_{\alpha\beta}^i|^2 \omega_{\alpha\beta}^3$  qu'on veut transformer en

$$\left(-\frac{i}{m} P_{\alpha\beta}^i\right) \left(\frac{i}{m} P_{\beta\alpha}^i\right) \omega_{\alpha\beta} =$$

$$\frac{1}{\hbar m^2} P_{\alpha\beta}^i ([P^i, H_A])_{\beta\alpha}$$

- la sommation sur  $\beta$  fait apparaître

$$([P^i, [P^i, H_A]])_{\alpha\alpha}$$

proportionnel à  $(\Delta V(r))_{\alpha\alpha}$

- Finalement, on trouve que le déplacement en  $\log \omega_M$  du niveau  $|\psi_\alpha\rangle$  vaut

$$(\Delta_2)_\alpha = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \frac{1}{2m^2} \log \frac{\omega_M}{\omega} (\Delta V(r))_{\alpha\alpha}$$

T-18]

Conclusion générale

pour les déplacements de niveaux

① La réaction de rayonnement est à l'origine d'une renormalisation de la masse (inertie électromagnétique de l'électron) qui affecte donc le terme d'énergie cinétique de l'électron.

② Les fluctuations du vide

- introduisent une énergie cinétique de vibration de l'électron qui déplace en bloc tous les niveaux.

- sont à l'origine d'un moyennage spatial du potentiel qui modifie l'énergie potentielle de l'électron.

T-19]

Effet de tous les autres termes

(Termes en  $\ddot{r}_j$  de la réaction de rayonnement et termes en  $\gamma_{\lambda \rightarrow \beta}$  des fluctuations du vide)

Décrivent les transitions radiatives entre niveaux et l'élargissement correspondant des transitions

Si l'on pose  $P_{\alpha} = |\varphi_{\alpha}\rangle\langle\varphi_{\alpha}|$ , on trouve

$$\left(\frac{d}{dt} P_{\alpha}\right)_{FV} = \sum_{E_{\lambda} > E_{\alpha}} \frac{1}{2} \gamma_{\lambda \rightarrow \alpha} (P_{\lambda} - P_{\alpha}) - \sum_{E_{\mu} < E_{\alpha}} \frac{1}{2} \gamma_{\alpha \rightarrow \mu} (P_{\alpha} - P_{\mu})$$

$$\left(\frac{d}{dt} P_{\alpha}\right)_{RR} = \sum_{E_{\lambda} > E_{\alpha}} \frac{1}{2} \gamma_{\lambda \rightarrow \alpha} (P_{\lambda} + P_{\alpha}) - \sum_{E_{\mu} < E_{\alpha}} \frac{1}{2} \gamma_{\alpha \rightarrow \mu} (P_{\alpha} + P_{\mu})$$

T-20]

XI-6

Effet total

$$\left(\frac{d}{dt} P_{\alpha}\right)_{FV+RR} = \sum_{E_{\lambda} > E_{\alpha}} \gamma_{\lambda \rightarrow \alpha} P_{\lambda} - \sum_{E_{\mu} < E_{\alpha}} \gamma_{\alpha \rightarrow \mu} P_{\mu}$$

Interprétation physique

La même que pour les atomes à 2 niveaux.

Les fluctuations du vide tendent à égaliser les populations des niveaux  $\alpha$  et  $\beta$  avec un taux  $\frac{1}{2} \gamma_{\alpha \rightarrow \beta}$

La réaction de rayonnement renforce les processus d'émission spontanée, compense exactement ceux "d'absorption spontanée".

Elle fait perdre de l'énergie au système atomique.

Quelques références pour l'approche équations de Heisenberg

- J.R. ACKERHALT, P.L. KNIGHT, J.H. EBERLY Phys. Rev. Lett 30, (1973), 456  
 I.R. SENITZKY Phys. Rev. Lett. 31 (1973), 955  
 P.W. MILONNI, J.R. ACKERHALT, W.A. SMITH Phys. Rev. Lett 31, (1973), 958  
 J.R. ACKERHALT, J.H. EBERLY Phys. Rev. D10, (1974), 3350  
 P.W. MILONNI, W.A. SMITH Phys. Rev A11, (1975), 819  
 D.W. MILONNI Physics Reports C25, (1976), 1

Pour la compensation entre effets des fluctuations du champ et effets des fluctuations du dipôle dans l'état fondamental voir

- V.M. FAIN, Y.I. KHANIN Quantum Electronics  
 (MIT Cambridge 1969) Vol I p.211