Calcul non relativiste du déplacement de Lamb

① Points de vue utilisés - Hamiltoniens

② Point de vue de Coulomb

- Calcul à l'ordre 2 inclus en q_α.
- Interprétation des divers terme

③ Point de vue de Pauli-Fierz

- Calcul à l'ordre 2 inclus en q_α
- Discussion physique. Justification de l'image de Welton - Effet des modes basse fréquence

④ Point de vue de Goppert-Mayer

- Calcul à l'ordre 2 inclus en q_α.
- Interprétation des divers termes. Importance de l'énergie propre dipolaire

---

Hamiltonien de Coulomb (à l'approximation non relativiste et des grandes longueurs d'onde)

$$H_{Coul} = \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{P}_\alpha - q_\alpha \vec{A}_\perp(\vec{0})\right]^2 + \varepsilon^\alpha_{Coul} + V_e(\vec{r}_\alpha) + H_R$$

$$= H_P + H_R + H_{I1} + H_{I2} \quad (1.1)$$

$$H_P = \frac{\vec{P}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} + V_e(\vec{r}_\alpha) + \varepsilon^\alpha_{Coul} \qquad \varepsilon^\alpha_{Coul} = \frac{q_\alpha^2 k_M}{4\pi^2\varepsilon_0} \quad (1.2)$$

$$H_{I1} = -\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\vec{P}_\alpha\cdot\vec{A}_\perp(\vec{0}) \qquad H_{I2} = \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha}\vec{A}_\perp^{\,2}(\vec{0}) \quad (1.3)$$

Transformation de Göppert-Mayer

$$T_{GM} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} q_\alpha \vec{r}_\alpha\cdot\vec{A}_\perp(\vec{0})\right] \quad (1.4)$$

$$T_{GM} = \exp\left\{\sum_j (\lambda_j^* a_j - \lambda_j a_j^+)\right\} \quad (1.5a)$$

$$\lambda_j = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega_j L^3}}\, q_\alpha\, \vec{\varepsilon}_j\cdot\vec{r}_\alpha \quad (1.5b)$$

$$T_{GM}\,\vec{r}_\alpha\,T_{GM}^+ = \vec{r}_\alpha \qquad T_{GM}\,\vec{P}_\alpha\,T_{GM}^+ = \vec{P}_\alpha + q_\alpha\vec{A}_\perp(\vec{0}) \quad (1.6)$$

$$T_{GM}\,a_j\,T_{GM}^+ = a_j + \lambda_j \qquad T_{GM}\,a_j^+\,T_{GM}^+ = a_j^+ + \lambda_j^* \quad (1.7)$$

T_{GM} est un opérateur de translation pour l'impulsion $\vec{P}_\alpha$ et pour les opérateurs a_j et a_j^+, mais non pour $\vec{r}_\alpha$. C'est aussi l'opérateur unitaire associé à un changement de jauge

Hamiltonien de Goppert-Mayer,

$$H_{GM} = T_{GM}\, H_{Coul}\, T_{GM}^{+} = \frac{1}{2m_\alpha}\vec{p}_\alpha^{\,2} + \varepsilon_{Coul}^{\alpha} + V_e(\vec{r}_\alpha) + \sum_j \hbar\omega_j\left[(a_j^+ + \lambda_j^*)(a_j+\lambda_j) + \tfrac{1}{2}\right] \quad (1.8)$$

$$H_{GM} = H_P + H_R + H'_{I1} + \varepsilon_{dip}^{\alpha} \quad (1.9)$$

$$H'_{I1} = \sum_j \hbar\omega_j\,(\lambda_j a_j^+ + \lambda_j^* a_j) = -\,q_\alpha\,\vec{r}_\alpha\cdot\vec{E}_\perp(\vec{0}) \quad (1.10)$$

$$\varepsilon_{dip}^{\alpha} = \sum_j \hbar\omega_j\,\lambda_j^*\lambda_j = \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{q_\alpha^2}{2\varepsilon_0 L^3}\,(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}_\alpha)^2 \quad (1.11)$$

Disparition du terme quadratique en $q_\alpha^2\vec{A}_\perp^2(\vec{0})/2m_\alpha$
Apparition de l'énergie propre dipolaire

Transformation de Pauli-Fierz

$$T_{PF} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{q_\alpha}{m_\alpha^*}\vec{p}_\alpha\cdot\vec{Z}(\vec{0})\right] \quad (1.12)$$

$$T_{PF} = \exp\left[\sum_j \beta_j^* a_j - \beta_j a_j^+\right] \quad (1.13.a)$$

$$\beta_j = \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega^3L^3}}\;\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_\alpha \quad (1.13.b)$$

$$T_{PF}\,\vec{r}_\alpha\,T_{PF}^+ = \vec{r}_\alpha + \vec{\xi}_\alpha = \vec{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*}\vec{Z}(\vec{0}) \qquad T_{PF}\,\vec{p}_\alpha\,T_{PF}^+ = \vec{p}_\alpha \quad (1.14)$$

$$T_{PF}\,a_j\,T_{PF}^+ = a_j + \beta_j \qquad T_{PF}\,a_j^+\,T_{PF}^+ = a_j^+ + \beta_j^* \quad (1.15)$$

Dans (1.12) $\quad m_\alpha^* = m_\alpha + \delta m \qquad \delta m = \dfrac{q_\alpha^2 k_M}{3\pi^2\varepsilon_0 c^2} = \dfrac{4}{3}\dfrac{\varepsilon_{Coul}^{\alpha}}{c^2}$ (1.16)

T_{PF} est un opérateur de translation pour la position $\vec{r}_\alpha$ et pour les opérateurs a_j et a_j^+, mais non pour $\vec{p}_\alpha$

La transformation T_{PF} n'est pas une transformation de jauge

Hamiltonien de Pauli-Fierz

$$H_{PF} = T_{PF}\,H_{Coul}\,T_{PF}^+$$
$$= \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha^*} + V_e\left(\vec{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*}\vec{Z}(\vec{0})\right) + \varepsilon_{Coul}^{\alpha} + H_R + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha}\vec{A}_\perp^2(\vec{0}) \quad (1.17)$$

Apparition de la masse corrigée dans l'énergie cinétique
Disparition des termes d'interaction H_{I1} : toute l'interaction est dans $V_e(\vec{r}_\alpha + \vec{\xi}_\alpha)$

Buts de ce cours

Calculer le déplacement de Lamb dans ces 3 points de vue. Les 3 résultats sont bien sur identiques mais les éclairages physiques sont différents

On se limitera au deplacement de Lamb de l'état fondamental $|a\rangle$ de H_P

$$H_P\,|a\rangle = E_a\,|a\rangle \quad (1.18)$$

Expression de $(\delta E_a)_{coul}$ (déplacement radiatif de $|a\rangle$ dans le point de vue de Coulomb)

- A l'ordre 2 inclus en q_α, il faut ajouter l'effet de H_{I2} à l'ordre 1 et celui de H_{I1} à l'ordre 2.

$$(\delta E_a)_{coul} = \langle a;0|H_{I2}|a;0\rangle + \sum_b \sum_{k\varepsilon} \frac{|\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}|H_{I1}|a;0\rangle|^2}{E_a - E_b - \hbar\omega} \qquad (2.1)$$

- $$\langle a;0|H_{I2}|a;0\rangle = \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha^2}\langle 0|\vec{A}_\perp^2(\vec{0})|0\rangle = \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega L^3} = \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{q_\alpha^2 \mathcal{E}_\omega^2}{2m_\alpha\omega^2} \qquad (2.2.a)$$

$$\langle a;0|H_{I2}|a;0\rangle = \delta m_{2\alpha} c^2 \qquad \frac{\delta m_{2\alpha}}{m_\alpha} = \frac{\alpha}{2\pi}\left(\frac{\hbar\omega_M}{m_\alpha c^2}\right)^2 \qquad (2.2.b)$$

(voir page (II-6))

- $$H_{I1} = -\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\vec{p}_\alpha\cdot\vec{A}_\perp(\vec{0}) = -\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega L^3}}(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_\alpha)(a_{k\varepsilon} + a^+_{k\varepsilon}) \qquad (2.3)$$

$$\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}|H_{I1}|a;0\rangle = -\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_{ba}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega L^3}} \qquad (2.4.a)$$

$$\vec{p}_{ba} = \langle b|\vec{p}|a\rangle \qquad (2.4.b)$$

- Dernier terme de (2.1)

$$-\frac{L^3}{(2\pi)^3}\sum_b\int_0^{k_M}k^2dk\int d\Omega\sum_{\vec{\varepsilon}\perp\vec{k}}\frac{q_\alpha^2\hbar}{m_\alpha^2\,2\varepsilon_0\omega L^3}\;\frac{\sum_{i,j=x,y,z}\varepsilon_i\varepsilon_j(p_i)_{ab}(p_j)_{ba}}{\omega+\omega_{ba}} \qquad (2.5)$$

$$\int d\Omega\sum_{\vec{\varepsilon}\perp\vec{k}}\varepsilon_i\varepsilon_j = \int d\Omega\left(\delta_{ij} - \frac{k_ik_j}{k^2}\right) = \frac{8\pi}{3} \qquad (2.6)$$

$$\hookrightarrow (2.5) = -\frac{q_\alpha^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m_\alpha^2c^2}\sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle\int_0^{k_M}\frac{k\,dk}{k+k_{ba}} \qquad (2.7)$$

$$\int_0^{k_M}\frac{k\,dk}{k+k_{ba}} = k_M - k_{ba}\int_0^{k_M}\frac{dk}{k+k_{ba}} = k_M - k_{ba}\,\mathrm{Log}\frac{k_M+k_{ba}}{k_{ba}} \simeq k_M - k_{ba}\,\mathrm{Log}\frac{k_M}{k_{ba}} \qquad (2.8)$$

- Terme en k_M de (2.5)

$$-\frac{q_\alpha^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m_\alpha^2c^2}k_M\langle a|\vec{p}^{\,2}|a\rangle = -\frac{\delta m_{1\alpha}}{m_\alpha}\langle a|\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_\alpha}|a\rangle \qquad (2.9)$$

- Terme en $\mathrm{Log}\,k_M$ de (2.5)

$$\frac{q_\alpha^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m_\alpha^2c^2}\sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle\left(\mathrm{Log}\frac{K_M}{k_{ba}}\right)\frac{E_b-E_a}{\hbar c} \qquad (2.10)$$

- Introduction du logarithme de Bethe $\mathrm{Log}\,K_0$ défini par

$$\sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle(\mathrm{Log}\,k_{ba})(E_b-E_a)$$
$$= \sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle(\mathrm{Log}\,K_0)(E_b-E_a) \qquad (2.11)$$

$$\hookrightarrow (2.5) = \frac{q_\alpha^2}{6\pi^2\varepsilon_0 m_\alpha^2c^3\hbar}\mathrm{Log}\frac{K_M}{K_0}\sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle(E_b-E_a) \qquad (2.12)$$

$$\sum_b\sum_i\langle a|p_i|b\rangle\langle b|p_i|a\rangle(E_b-E_a) = \sum_i\langle a|p_i[H_p,p_i]|a\rangle = -\sum_i\langle a|[H_p,p_i]p_i|a\rangle$$
$$= \frac{1}{2}\langle a|\sum_i[p_i,[H_p,p_i]]|a\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\langle a|\Delta V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle \qquad (2.13)$$

↳ Terme en Log k_M (avec $\alpha = q_\alpha^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$, $\lambda\!\!\!^{-}_c = \hbar/m_\alpha c$)

$$\frac{q_\alpha^2\hbar}{12\pi^2\varepsilon_0 m_\alpha^2 c^3}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_0}\,\langle a|\Delta V_e|a\rangle = \frac{\alpha}{3\pi}\,\lambda\!\!\!^{-}_c{}^2\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_0}\,\langle a|\Delta V_e|a\rangle \qquad (2.14)$$

Récapitulation (2.2.b) + (2.9) + (2.14)

$$(\delta E_a)_{\mathrm{Coul}} = \delta m_{2\alpha}c^2 + -\frac{\delta m_{1\alpha}}{m_\alpha}\langle a|\frac{\vec{P}^2}{2m_\alpha}|a\rangle + \frac{\alpha}{3\pi}\lambda\!\!\!^{-}_c{}^2\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_0}\langle a|\Delta V_e|a\rangle \qquad (2.15)$$

Discussion physique

- Terme $\delta m_{2\alpha}c^2$: Energie cinétique de vibration de l'électron dans les fluctuations du vide (voir cours II, page II-6)
- Terme $-\frac{\delta m_{1\alpha}}{m_\alpha}\langle a|\frac{\vec{P}^2}{2m_\alpha}|a\rangle$

  Modification de l'energie cinétique due à la correction de masse $\delta m_{1\alpha}$.

  Si on mettait $m_\alpha^* = m_\alpha + \delta m_{1\alpha}$ dans H_P, on n'obtiendrait pas un tel terme.

- Terme en Log $\frac{k_M}{k_0}$: Déplacement de Lamb de $|a\rangle$

  Formule établie la première fois par Bethe

  Moyennage de V_e sur un mouvement de vibration d'amplitude de l'ordre de $\lambda\!\!\!^{-}_c\sqrt{\alpha}\sqrt{\mathrm{Log}(k_M/k_0)}$ où $\lambda\!\!\!^{-}_c$ est la longueur d'onde de Compton et α la constante de structure fine.

Point de vue de Pauli-Fierz

$$V_e(\vec{r}_\alpha + \vec{\xi}_\alpha) = V_e(\vec{r}_\alpha) + \vec{\xi}_\alpha\cdot\vec{\nabla}V_e(\vec{r}_\alpha) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j \xi_{\alpha i}\xi_{\alpha j}\nabla_i\nabla_j V_e(\vec{r}_\alpha) + \cdots \;;$$

$$= V_e(\vec{r}_\alpha) + H_{I1}^{PF} + H_{I2}^{PF} + \cdots \qquad (2.1)$$

$$H_{I1}^{PF} = \vec{\xi}_\alpha\cdot\vec{\nabla}V_e(\vec{r}_\alpha) = \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*}\vec{Z}(\vec{0})\cdot\vec{\nabla}V_e = \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*}\sum_i Z_i(0)(\nabla_i V_e) \qquad (2.2)$$

$$H_{I2}^{PF} = \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha^{*2}}\sum_i\sum_j Z_i(\vec{0})Z_j(\vec{0})\,\nabla_i\nabla_j V_e \qquad (2.3)$$

$V_e(\vec{r}_\alpha)$ se regroupe avec $\frac{\vec{P}^2}{2m_\alpha^*}$ pour donner H_P (avec m_α^* au lieu de m_α)

Pour calculer $(\delta E_a)_{PF}$, il faut calculer l'effet de H_{I2}^{PF} à l'ordre 1 et celui de H_{I1}^{PF} à l'ordre 2 (ainsi que celui du dernier terme de 1.17 à l'ordre 1)

Effet de H_{I2}^{PF} à l'ordre 1 $\qquad \delta E'_a = \langle a;0|\,H_{I2}^{PF}\,|a;0\rangle \qquad (2.4)$

$$\delta E'_a = \frac{1}{2}\frac{q_\alpha^2}{m_\alpha^2}\sum_{i,j=x,y,z}\langle 0|Z_i(\vec{0})Z_j(\vec{0})|0\rangle\langle a|\nabla_i\nabla_j V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle \qquad (2.5)$$

$$\langle 0|Z_i(\vec{0})Z_j(\vec{0})|0\rangle = \delta_{ij}\,\frac{1}{3}\,\langle 0|\vec{Z}^2(\vec{0})|0\rangle \qquad (2.6)$$

$$\langle 0|\vec{Z}^2(\vec{0})|0\rangle = \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega^3L^3}\,\vec{\varepsilon}^{\,2} = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_{k_m}^{k_M} k^2 dk\, d\Omega\, \frac{\hbar}{\varepsilon_0 c^3 k^3 L^3} \qquad (2.7)$$

L'intégrale sur k doit être faite entre des bornes k_M et k_m pour éviter la divergence logarithmique à la borne inférieure

$$\hookrightarrow \quad \langle 0|\vec{Z}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0\pi^2c^3}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_m} \qquad (2.8)$$

$$\hookrightarrow \quad \delta E'_a = \frac{1}{6}\frac{q_\alpha^2}{m_\alpha^2}\langle 0|\vec{Z}^2|0\rangle\langle a|\Delta V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle =$$

$$= \frac{\hbar q_\alpha^2}{12\varepsilon_0\pi^2m_\alpha^2c^3}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_m}\langle a|\Delta V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle = \frac{\alpha}{3\pi}\,\lambda\!\!\!^{-}{}_c^{\,2}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_m}\langle a|\Delta V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle \qquad (2.9)$$

<u>Effet de H_{I1}^{PF} à l'ordre 2</u>
$(\hbar\omega_{ba} = E_b - E_a)$

$$\delta E''_a = \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}\sum_b \frac{|\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|H_{I1}^{PF}|a;0\rangle|^2}{-\hbar(\omega_{ba}+\omega)} \qquad (2.10)$$

$$\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|H_{I1}^{PF}|a;0\rangle = \frac{q_\alpha}{m_\alpha}\langle b|\vec{\nabla}V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle\cdot\langle\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|\vec{Z}(\vec{0})|0\rangle \qquad (2.11)$$

$$= i\,\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega^3L^3}}\,\langle b|\vec{\varepsilon}\cdot\vec{\nabla}V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle$$

$$|\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|H_{I1}^{PF}|a;0\rangle|^2 = \frac{q_\alpha^2}{m_\alpha^2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega^3L^3}\sum_{i,j=x,y,z}\langle b|\varepsilon_i(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|\varepsilon_j(\nabla_jV_e)|b\rangle \qquad (2.12)$$

$$\delta E''_a = -\frac{L^3}{(2\pi)^3}\sum_b\int_{k_m}^{k_M}k^2dk\int d\Omega\sum_{\vec{\varepsilon}}\sum_{i,j}\frac{q_\alpha^2}{m_\alpha^2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0c^3k^3L^3}\times$$

$$\times\ \frac{\varepsilon_i\varepsilon_j\langle b|(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_jV_e)|b\rangle}{c(k+k_{ba})} \qquad (2.13)$$

$$\int d\Omega\sum_{\vec{\varepsilon}}\varepsilon_i\varepsilon_j = \int d\Omega\left(\delta_{ij}-\frac{k_ik_j}{k^2}\right) = \frac{8\pi}{3}\delta_{ij}$$

$$\hookrightarrow\quad \delta E''_a = -\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2m_\alpha^2c^4}\sum_b\sum_i\langle b|(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_iV_e)|b\rangle\int_{k_m}^{k_M}\frac{dk}{k(k+k_{ba})} \qquad (2.14)$$

$$\frac{1}{k(k+k_{ba})} = \frac{1}{k_{ba}}\left(\frac{1}{k}-\frac{1}{k+k_{ba}}\right) \qquad (2.15)$$

$$\int_{k_m}^{k_M}\frac{dk}{k(k+k_{ba})} = \frac{1}{k_{ba}}\left[\mathrm{Log}\,\frac{k_M}{k_m}-\mathrm{Log}\,\frac{k_M+k_{ba}}{k_m+k_{ba}}\right] \simeq \frac{1}{k_{ba}}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_{ba}}{k_m} \qquad (2.16)$$

car $k_{ba} \ll k_M$ et $k_m \ll k_{ba}$

$$\hookrightarrow\quad \delta E''_a = -\frac{\hbar q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2m_\alpha^2c^3}\sum_b\sum_i\frac{\langle b|(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_iV_e)b\rangle}{E_b-E_a}\,\mathrm{Log}\,\frac{k_{ba}}{k_m} \qquad (2.17)$$

<u>Introduction de K'_0</u>. Dans $\sum_b\sum_i$, $\mathrm{Log}\,k_{ba}$ varie lentement avec b devant les autres facteurs. On introduit K'_0 défini par

$$\sum_b\frac{\langle b|(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_iV_e)|b\rangle}{E_b-E_a}\,\mathrm{Log}\,k_{ba} = \mathrm{Log}\,K'_0\sum_b\frac{\langle b|(\nabla_iV_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_iV_e)|b\rangle}{E_b-E_a} \qquad (2.18)$$

où $\hbar cK'_0$ est de l'ordre de E_I (énergie d'ionisation)

Raccord avec le calcul précédent

$$[P_i, H_P] = -i\hbar\, \partial H_P / \partial r_i = -i\hbar (\nabla_i V_e) \tag{2.19}$$

$$\langle b|P_i|a\rangle (E_b - E_a) = -i\hbar \langle b|(\nabla_i V_e)|a\rangle \tag{2.20}$$

On en déduit que

$$\sum_{bi} \frac{\langle b|(\nabla_i V_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_i V_e)|b\rangle}{E_b - E_a} \operatorname{Log} k_{ba} = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{bi} \langle b|P_i|a\rangle\langle a|P_i|b\rangle (E_b - E_a) \operatorname{Log} k_{ba} \tag{2.21}$$

ce qui montre, par comparaison avec (2.11) que $K'_0 = K_0$

$$\hookrightarrow \quad (\delta E''_a)_{PF} = -\frac{\hbar q_\alpha^2}{6\varepsilon_0 \pi^2 m_\alpha^2 c^3} \operatorname{Log}\frac{K_0}{k_m} \sum_b \frac{\langle b|(\nabla_i V_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_i V_e)|b\rangle}{E_b - E_a} \tag{2.22}$$

Par ailleurs, en utilisant de nouveau (2.20), on obtient

$$\begin{aligned}
\sum_{b,i} \frac{\langle b|(\nabla_i V_e)|a\rangle\langle a|(\nabla_i V_e)|b\rangle}{E_b - E_a} &= \frac{1}{i\hbar}\sum_{b,i} \langle b|P_i|a\rangle\langle a|\nabla_i V_e|b\rangle \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\sum_{b,i} \langle b|\nabla_i V_e|a\rangle\langle a|P_i|b\rangle \\
&= \frac{1}{2i\hbar}\sum_i \langle a|(\nabla_i V_e)P_i - P_i(\nabla_i V_e)|a\rangle \\
&= \frac{1}{2i\hbar}\sum_i \langle a|[(\nabla_i V_e), P_i]|a\rangle = \frac{1}{2}\langle a|\Delta V_e|a\rangle
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$\hookrightarrow \quad (\delta E''_a)_{PF} = -\frac{\hbar q_\alpha^2}{12\varepsilon_0 \pi^2 m_\alpha^2 c^3} \operatorname{Log}\frac{K_0}{k_m} \langle a|\Delta V_e(\vec{r}_\alpha)|a\rangle \tag{2.24}$$

Récapitulation On ajoute (2.9), (2.24) et la valeur moyenne du dernier terme de 1.17 qui n'est autre que (2.2.b)

$$\begin{aligned}
(\delta E_a)_{PF} &= \delta m_{2\alpha} c^2 + \frac{\hbar q_\alpha^2}{12\varepsilon_0 \pi^2 m_\alpha^2 c^3} \operatorname{Log}\frac{K_M}{K_0} \langle a|\Delta V_e|a\rangle \\
&= \delta m_{2\alpha} c^2 + \frac{\alpha}{3\pi} \lambda\!\!\!^{-}_c{}^2 \operatorname{Log}\frac{K_M}{K_0}\langle a|\Delta V_e|a\rangle
\end{aligned} \tag{2.25}$$

qui ne présente plus de dépendance en k_m (disparition de la divergence infrarouge

---

Discussion physique . Confirmation de l'image de Welton

- l'expression de $(\delta E'_a)_{PF}$ coïncide exactement avec le résultat correspondant à cette image et calculé en prenant pour amplitude de vibration dans le mode ω la valeur $\xi_\omega = q_\alpha \mathcal{E}_\omega / m_\alpha^* \omega^2$ correspondant à une particule libre.

  Cette valeur de ξ_ω est correcte pour $\hbar\omega \gg E_I$.

  Par contre, pour $\hbar\omega \lesssim E_I$, le fait que l'électron soit lié entraîne que l'amplitude de vibration est moins grande. C'est cet effet de liaison atomique qui fait disparaître la divergence en k_m et qui est décrit par $(\delta E''_a)_{PF}$.
- L'avantage du point de vue de Pauli-Fierz est d'incorporer directement la correction de masse δm_α dans l'hamiltonien atomique.

Calcul de $(\delta E_a)_{GM}$ dans le point de vue de Göppert-Mayer

$$(\delta E_a)_{GM} = \langle a;0|\mathcal{E}^\alpha_{dip}|a;0\rangle + \sum_b \sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} q_\alpha^2 \frac{|\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|\,\vec{r}_\alpha\cdot\vec{E}_\perp(0)\,|a;0\rangle|^2}{E_a - E_b - \hbar\omega} \qquad (4.1)$$

$$(\delta E'_a)_{GM} = \langle a;0|\mathcal{E}^\alpha_{dip}|a;0\rangle = \frac{q_\alpha^2}{2\varepsilon_0 L^3}\frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_0^{k_M} k^2 dk \int d\Omega \sum_{\vec{\varepsilon}}\sum_{i,j} \varepsilon_i \varepsilon_j \langle a|r_{\alpha i} r_{\alpha j}|a\rangle$$

$$= \frac{q_\alpha^2 k_M^2}{18\varepsilon_0 \pi^2}\sum_b (\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba} \qquad (4.2)$$

Calcul du 2ème terme $(\delta E''_a)_{GM}$ de (4.1) $\qquad \vec{E}_\perp(\vec{0}) = i\sum_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3}}\,\vec{\varepsilon}\,(a_{k\varepsilon} - a^+_{k\varepsilon}) \quad (4.3)$

$$\langle b;\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|\,\vec{r}_\alpha\cdot\vec{E}_\perp(\vec{0})\,|a;0\rangle = -i\sum_j \varepsilon_j (r_{\alpha j})_{ba}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3}} \qquad (4.4)$$

$$(\delta E''_a)_{GM} = -\frac{q_\alpha^2}{2\varepsilon_0 L^3}\sum_b \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_0^{k_M} k^2 dk \frac{\hbar c k}{\hbar c(k+k_{ba})}\int d\Omega \sum_{i,j}\sum_{\vec{\varepsilon}} \varepsilon_i \varepsilon_j (r_{\alpha i})_{ab}(r_{\alpha j})_{ba}$$

$$= -\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2}\sum_b (\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba}\int_0^{k_M}\frac{k^3 dk}{k+k_{ba}} \qquad (4.5)$$

$$\frac{k^3}{k+k_{ba}} = \frac{k^2(k+k_{ba}) - k_{ba}(k+k_{ba})k + k_{ba}^2(k+k_{ba}) - k_{ba}^3}{k+k_{ba}} = k^2 - k_{ba}k + k_{ba}^2 - \frac{k_{ba}^3}{k+k_{ba}} \qquad (4.6)$$

Terme en k_M^3 de $(\delta E''_a)_{GM}$ $\qquad -\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2}\sum_b (\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba}\frac{k_M^3}{3} = -(\delta E'_a)_{GM} \quad (4.7)$

Se compense exactement avec $(\delta E'_a)_{GM} = \langle a;0|\mathcal{E}^\alpha_{dip}|a;0\rangle$ (voir (4.2))

Terme en k_M^2 de $(\delta E''_a)_{GM}$ $\quad = +\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2}\frac{k_M^2}{2}\sum_b (\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba}\,k_{ba} \quad (4.8)$

Or $\quad [r_{\alpha i}, H_P] = i\hbar\,\partial H_P/\partial p_{\alpha i} = i\hbar\, p_{\alpha i}/m_\alpha \quad (4.9)$

$\hookrightarrow \quad (\vec{r}_\alpha)_{ab}(E_b - E_a) = i\hbar(\vec{p}_\alpha)_{ab}/m_\alpha \;\longrightarrow\; k_{ba}(\vec{r}_\alpha)_{ab} = i(\vec{p}_\alpha)_{ab}/m_\alpha c \quad (4.10)$

$$\sum_b (\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba} = \frac{i}{m_\alpha c}(\vec{p}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha)_{aa} = -\frac{i}{m_\alpha c}(\vec{r}_\alpha\cdot\vec{p}_\alpha)_{aa} = -\frac{i}{2m_\alpha c}\sum_j([r_{\alpha j}, p_{\alpha j}])_{aa} = \frac{3\hbar}{2m_\alpha c} \qquad (4.11)$$

$$\hookrightarrow \quad (4.8) = \frac{q_\alpha^2\hbar k_M^2}{8\varepsilon_0\pi^2 m_\alpha c} = \frac{\alpha}{2\pi}\frac{(\hbar\omega_M)^2}{m_\alpha c^2} = \delta m_{2\alpha}c^2 \qquad (4.12)$$

On retrouve le terme $\langle a;0|H_{I2}|a;0\rangle$ de $(\delta E_a)_{Coul}$ donné en (2.7.b)

Termes en k_M et $\log k_M$ de $(\delta E''_a)_{GM}$ (Contribution des 2 derniers termes de (4.6))

$$-\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2}\int_0^{k_M} dk \sum_b \left(k_{ba}^2 - \frac{k_{ba}^3}{k+k_{ba}}\right)(\vec{r}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{r}_\alpha)_{ba} =$$

$$= -\frac{q_\alpha^2}{6\varepsilon_0\pi^2 m_\alpha^2 c^2}\sum_b (\vec{p}_\alpha)_{ab}\cdot(\vec{p}_\alpha)_{ba}\int_0^{k_M} dk\left(1 - \frac{k_{ba}}{k+k_{ba}}\right) \qquad (4.13)$$

Comme $1 - \frac{k_{ba}}{k+k_{ba}} = \frac{k}{k+k_{ba}}$, l'expression (4.13) coïncide avec l'expression (2.7) donnant la contribution de H_{I1} à l'ordre 2 dans le point de vue de Coulomb.

Finalement, $(\delta E_a)_{GM} = (\delta E_a)_{Coul}$. On retrouve bien le même résultat dans les 2 points de vue, à condition bien sûr de ne pas oublier la contribution de l'énergie propre dipolaire