Sur une nouvelle méthode de calcul du décalage de Lamb, et le calcul avec retardation de l'effet photoélectrique

Roger Boudet*, Bruno Blaive**

*Université de Provence, Pl. V. Hugo, 13331 Marseille.
**CNRS, Faculté des Sciences de Saint-Jérôme, 13397 Marseille Cedex 20.

ABSTRACT. A new method of calculation of the Lamb shift, based on the establishing of the exact functions which correspond to the contribution of each state to the shift of one level, is proposed. As a complement of the calculation of the contribution of the discrete levels, previously published, we calculate here these functions for the contribution of the continuum to the 1S level, in the non relativistic approach.

The method employed for the construction of these functions is the same as the one used by Sommerfeld and Schur for the non relativistic determination with retardation of the photoelectric effect.

1 Introduction

Les différents calculs proposés jusqu'ici pour le décalage de Lamb d'un niveau d'énergie du spectre discret, sont en bon accord avec l'expérience, mais présentent l'inconvénient de contenir des approximations qui, sans le recours à des études extérieures aux méthodes de calcul utilisées, ne sont pas chiffrables.

Ainsi le premier calcul non relativiste de Bethe [1] du décalage de $2S$ donnait des résultats voisins de l'expérience de Lamb et Retherford, mais il s'est vite révélé qu'un élément du calcul était inacceptable. Bethe avait estimé à mc^2 le cut-off des intégrales divergentes imposées par le recours à "l'approximation dipolaire" (elle consiste à supprimer l'exponentielle dans la formule (2) ci-dessous), et ainsi trouvé un résultat de 1040 MHz voisin des 1000 puis 1052 MHz de l'expérience. Or quelques mois plus tard [2] Dyson proposait un calcul dans lequel le cut-off de la formule de Bethe était ramené à αmc^2, qui effectivement, comme le montre numériquement de manière précise l'étude [3], convient tout à fait pour l'approximation dipolaire, mais seulement pour les basses énergies. Si Bethe avait appliqué à sa formule le cut-off de αmc^2, il aurait obtenu 380 MHz, au lieu de 1040, et il faut remercier la coïncidence qui l'a conduit à un bon résultat, car avec une telle valeur il aurait peut-être renoncé à l'explication du phénomène, l'action du propre champ de l'électron.

Ce calcul a donc été rectifié par un nouveau calcul ([2], [4], [5]), relativiste et avec "retardation" (c'est à dire prenant en compte l'exponentielle de (2)) pour la contribution des états de l'électron à haute énergie, tout en conservant le calcul non relativiste et sans retardation de Bethe pour les états de basses énergies. Il fait cependant intervenir encore un cut-off commun, supérieur pour ceux-ci, et inférieur pour ceux-là, situé dans les énergies intermédiaires, et qui s'élimine. Ainsi un degré d'arbitraire demeure-t-il dans ces calculs. Bien que plus acceptable que le premier, il n'en reste pas moins lié à l'indétermination de principe, soulignée dès le début comme critiquable [4], qui consiste à envisager un nombre fini comme la différence de deux grandeurs infinies.

D'autres calculs ayant pour but de supprimer l'arbitraire de ce cut-off, ont été proposés [6], [7], mais il sont non relativistes et font intervenir d'autres approximations.

On aboutit ainsi à une situation un peu paradoxale. De petites corrections au décalage, comme la prise en compte de la masse ou de la taille du noyau sont effectuées, alors que demeure une incertitude sur ce qui constitue l'essentiel du décalage, à savoir la résolution de la formule standard (1) ci-dessous.

De plus les calculs proposés font intervenir, d'une façon certes très élégante, une formule de complétude, dont le caractère global ne permet pas de détailler les contributions des différents états, et ne donne pas ainsi une image précise du phénomène.

La démarche que nous proposons va paraître certainement moins élégante, mais nous pensons qu'elle est plus sûre et plus instructive. Elle consiste à pousser aussi loin qu'il est possible le calcul, par des méthodes analytiques, de la contribution de *chaque état* (c'est une intégrale convergente qui ne nécessite aucun cut-off), et de le compléter par des méthodes numériques qu'on peut pousser jusqu'à tout degré de précision désiré. Remarquons que le recours au calcul numérique n'est absent d'aucun des calculs précédemment cités.

Nous avons initié cette méthode dans la présente revue [8], pour la contribution non relativiste des deux premiers niveaux au décalage de 1S. Le calcul a été ensuite poussé par B. Blaive et al. [9] à la contribution de tous les niveaux du spectre discret. Signalons que ces calculs ont étés retrouvés par J. Seke [10], [11] de manière tout à fait indépendante: 395,01 MHz dans [9] pour la contribution du spectre discret au décalage de 1S, contre 395,76 MHz dans [10], puis de nouveau 395,76 MHz dans [3], de façon indépendante de [10]. Cette concordance est remarquable vu la différence des approches respectives: le point de départ de l'étude de Seke est la théorie quantique des champs, alors qu'il est pour la nôtre la théorie semi-classique où le champ n'est pas quantifié (en fait les deux théories donnent exactement la même formule standard (1) ci-dessous). De plus l'étude de Seke effectue un calcul séparé pour la partie non renormalisée du décalage et le terme de renormalisation, alors que la nôtre prend en compte la renormalisation dès le départ. Enfin le calcul fait intervenir une suite infinie (mais qui converge rapidement) d'intégrales de fractions rationnelles dont le degré augmente indéfiniment, qui sont les mêmes dans les deux études, mais dont le calcul nécessite le recours à des méthodes de calcul par approximations qui ont été certainement différentes. Au vu de la concordance de ces résultats, on peut être assuré de la validité de la démarche, pour le spectre discret. Cela rend crédible son extension au spectre continu.

Un premier prolongement, abordé dans [12], montre que le calcul relativiste des contributions au décalage, s'il est non négligeable, n'apporte cependant pas de modification importante au calcul non relativiste, quand on se cantonne aux contributions du spectre discret. Cela s'explique parce que tant que les niveaux d'énergie de l'électron sont de l'ordre du Rydberg = $\alpha^2 mc^2/2$, les différences entre les résultats donnés par l'emploi de l'équation de Schrödinger ou de Pauli et celle de Dirac ne sont pas très importants et découlent tous de l'approximation $Z^2\alpha^2 << 1$, réduite donc à $\alpha^2 << 1$ dans le cas particulièrement intéressant de l'atome d'hydrogène.

Il n'en n'est pas du tout de même dès lors qu'on passe aux énergies élevées du spectre continu, et on peut s'attendre à des différences importantes dans l'usage de l'équation de Schrödinger ou de Dirac. Il est intéressant cependant de connaître quelle est la part due à cette différence, et celle due à l'approximation dipolaire, dans l'application de la formule non relativiste de Bethe qui reste encore utilisée dans les formules donnant le décalage. Il est aussi intéressant de savoir jusqu'à quel niveau d'énergie des états contribuant au décalage le calcul non relativiste peut être considéré comme satisfaisant. C'est la raison pour laquelle les formules analytiques d'un premier calcul non relativiste sont établies ici. Les calculs complémentaires et les résultats numériques sont exposés dans une deuxième étude [3]. Le calcul relativiste, basé sur l'application au spectre continu des formules générales de [12], est en cours d'élaboration.

2 La formule standard du décalage de Lamb

Le décalage de Lamb ΔE_1 d'un niveau d'énergie E_1 est donné par la formule (voir [8], éq. (29))

$$\Delta E_1 = \sum_p \Delta E_{1p}, \quad \Delta E_{1p} = \alpha \frac{(E_1 - E_p)}{4\pi^2} \int \frac{\mathbf{T}^{\perp}_{X1p}(-\mathbf{k}).\mathbf{T}^{\perp}_{X1p}(\mathbf{k})}{(\frac{E_1-E_p}{\hbar c} - k)} \frac{d\mathbf{k}}{k^2} \tag{1}$$

où α est la constante de structure fine, avec

$$\mathbf{T}^{\perp}_{X1p}(\mathbf{k}) = \int e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r})} \mathbf{j}^{\perp}_{X1p}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \qquad X = I, II \tag{2}$$

$$\mathbf{j}^{\perp} = \mathbf{j} - (\mathbf{j}.\mathbf{K})\mathbf{K}, \ \ \mathbf{K} = \mathbf{k}/k, \ \ k = |\mathbf{k}| \tag{3}$$

et où les $\mathbf{j}_{X1p}(\mathbf{r})$ correspondent aux parties spatiales du courant de transition (divisé par 2) d'un état p à l'état 1

$$\mathbf{j}_{1p}(x^0, \mathbf{r}) = \cos \Omega_{1p} x^0 \, \mathbf{j}_{I1p}(\mathbf{r}) + \sin \Omega_{1p} x^0 \, \mathbf{j}_{II1p}(\mathbf{r}) \tag{4}$$

où $\Omega_{1p} = (E_1 - E_p)/\hbar c$ et $x^0 = ct$.

La formule non relativiste s'obtient en considérant le courant de Schrödinger

$$2\mathbf{j}_{1p}(x^0, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{imc} (\Psi_1^* \nabla \Psi_p - \Psi_p^* \nabla \Psi_1) \tag{5}$$

et la formule relativiste en considérant le courant de Dirac

$$2 j^{\mu}_{1p}(x^0, \mathbf{r}) = \overline{\Psi}_1 \gamma^{\mu} \Psi_p + \overline{\Psi}_p \gamma^{\mu} \Psi_1, \ \ (\mu = 1, 2, 3) \tag{6}$$

La sommation (1) se fait sur tous les états p de l'électron. Cela inclut aussi bien ceux du spectre discret que ceux du spectre continu, pour lesquels la somme (1) doit être considérée comme une intégrale, qui correspond à tous les niveaux d'énergie supérieurs à mc^2.

On ne retient en fait que les états tels que le courant de transition ait des valeurs significatives, ce qui libère le calcul de la prise en compte des transitions interdites.

Nous rappelons que la formule (1) peut être établie par l'usage des opérateurs de création et d'annihilation de la théorie quantique des champs et la méthode des perturbations ([2], [4], [5]), ou plus simplement par l'emploi du champ électromagnétique non quantifié en jauge de Coulomb, et le couplage de ce champ à l'équation de Schrödinger ou de Dirac selon le cas [13], [12].

Cette formule a été établie dans [14] d'une façon encore plus simple en considérant l'énergie d'interaction avec le champ qu'ils créent, des courants périodiques de transition d'un système à états stationnaires quelconque, et en appliquant la formule générale ainsi obtenue aux courants de transition entre états de l'équation de Schrödinger ou de Dirac. Une justification de l'emploi de la jauge de Coulomb pour ces derniers courants est donnée dans [12].

Ainsi la polémique qui oppose depuis des décennies les partisans de la théorie quantique des champs (TQC) et ceux de la théorie semi-classique (TSC) devrait-elle être définitivement close, tout au moins en ce qui concerne l'utilisation de l'une ou l'autre théorie dans le calcul du décalage de Lamb.

Le reproche fait à la TQC de mener à des intégrales divergentes est injustifié. C'est la *méthode de résolution* de la formule standard (1), *non pas la formule*, qui est à l'origine des intégrales divergentes. Cette méthode a été initialement choisie par nécessité, vu les difficultés de celle que nous abordons ici. Leurs auteurs ([2], [4], [5]) en étaient tout à fait conscients et n'ont jamais attribué la "catastrophe ultraviolette" à autre chose qu'une faiblesse de calcul, excluant de la placer dans la manifestation d'un phénomène physique propre à la théorie. Si des reproches fondamentaux peuvent être faits à la TQC ils se trouvent ailleurs [15].

D'un autre côté, le reproche fait à la TSC d'être incapable de mener aux bons résultats tombe de lui-même à la simple comparaison des formules de [4] et [13], des résultats numériques de [10] et [9], [3].

On ne pourra cependant pas, en définitive, ne pas accorder à la TSC le mérite de la simplicité conceptuelle et de calcul pour l'établissement de la formule standard (1).

3 Transition d'un état P du spectre continu à l'état $1S$

Nous ferons le calcul pour les transitions $P_0 - 1S$. Le calcul correspondant à P_+ et P_- conduit à la même valeur de $|\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k})|$.

Les composantes spatiales des fonctions d'onde ψ_1 et ψ_n associées à l'état $1S$ et à un état P_0 d'énergie $E > mc^2$ sont

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\left[\frac{Z}{a}\right]^{3/2} e^{-Zr/a}, \quad \psi_n(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\cos\theta R(r) \tag{7}$$

où, si l'on pose

$$\varepsilon = \frac{E}{mc^2}, \quad n = \frac{Z\alpha}{[2(\varepsilon-1)]^{1/2}} \tag{8}$$

la fonction radiale $R(r)$, considérée dans la normalisation par rapport à l'échelle d'énergie ε est (voir [16] éq. (4.23)), $F(A, C, x)$ désignant la fonction de x hypergéométrique confluente et a le rayon de Bohr,

$$R(r) = \frac{2}{3\alpha a}\left[\frac{Z}{a}\right]^{3/2} H(n)L(n,r)$$

$$\begin{aligned} H(n) &= \frac{[1+n^2]^{1/2}}{n[1-e^{-2n\pi}]^{1/2}}, \\ L(n,r) &= re^{-iZr/an}F(2+in, 4, i\frac{2Zr}{na}) \end{aligned} \tag{9}$$

On a $\mathbf{j}_{I1n} = 0$, et par suite on a à considérer seulement le vecteur $\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k}) = \mathbf{T}^\perp_{II1n}(\mathbf{k})$.

On peut écrire ([8] p. 163)

$$\int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}[\psi_n \nabla\psi_1]^\perp d\mathbf{r} = -\int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}[\psi_1\nabla\psi_n]^\perp d\mathbf{r} \tag{10}$$

et par suite on déduit de (5)

$$\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{mc}\int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}[\psi_n\nabla\psi_1]^\perp d\mathbf{r}, \quad \frac{\hbar}{mc} = \alpha a \tag{11}$$

Plaçons-nous dans un repère orthonormal positif $\mathbf{I}, \mathbf{J}, \mathbf{K}$ où $\mathbf{K} = \mathbf{k}/k$ et définissons

$$\mathbf{r} = r\mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \cos\hat{\theta}\,\mathbf{K} + \sin\hat{\theta}\,\mathbf{U}, \quad \mathbf{U} = \cos\hat{\varphi}\,\mathbf{I} + \sin\hat{\varphi}\,\mathbf{J}$$

en supposant que si $\mathbf{e}_3$ est le vecteur définissant la direction commune des orbitales de ψ_1, ψ_n on ait

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_3 &= \cos\theta_0\,\mathbf{K} + \sin\theta_0\,\mathbf{I}, \\ \mathbf{n}.\mathbf{e}_3 &= \cos\theta = \cos\hat{\theta}\cos\theta_0 + \sin\hat{\theta}\sin\theta_0\cos\hat{\varphi} \end{aligned} \tag{12}$$

On en déduit

$$[\nabla(e^{-Zr/a})]^\perp = [\mathbf{n}(e^{-Zr/a})']^\perp = -\frac{Z}{a}e^{-Zr/a}\sin\hat{\theta}\mathbf{U} \tag{13}$$

$$\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k}) = \alpha a\left[-\frac{Z}{a}\right]\left[\frac{Z}{a}\right]^3 \frac{2\sqrt{3}}{4\pi}\frac{2}{3\alpha a}H(n)\int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}e^{-Zr/a}L(n,r)\cos\theta\sin\hat{\theta}\mathbf{U}d\mathbf{r} \tag{14}$$

Posant $d\mathbf{r} = r^2\sin\hat{\theta}d\hat{\theta}d\hat{\varphi}dr$, on a

$$\int_0^{2\pi}\mathbf{U}\,d\hat{\varphi} = 0, \quad \int_0^{2\pi}\sin\hat{\theta}\cos\theta\mathbf{U}\,d\hat{\varphi} = \pi\sin^2\hat{\theta}\sin\theta_0\mathbf{I} \tag{15}$$

et on déduit facilement du changement de variable $\cos\hat\theta = x$,

$$\int_0^\pi e^{\pm ikr\cos\hat\theta}\sin^3\hat\theta d\hat\theta = 4J(kr),\quad J(kr) = \frac{\sin kr}{(kr)^3} - \frac{\cos kr}{(kr)^2} \tag{16}$$

$$\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k}) = \mathbf{T}^\perp(-\mathbf{k}) = -\frac{4}{\sqrt{3}}H(n)\left[\frac{Z}{a}\right]^4 I(n,k)\sin\theta_0\mathbf{I} \tag{17}$$

$$I(n,k) = \int_0^\infty \exp[-(1+\frac{i}{n})\frac{Zr}{a}]J(kr)r^3F(2+in,4,i\frac{2Zr}{na})dr \tag{18}$$

La fonction hypergéométrique confluente admet la représentation intégrale (voir [17], éq. (d.9))

$$F(A,C,x) = \frac{g(A,C)}{2\pi i}\int_C e^{xu}(-u)^{A-1}(1-u)^{C-A-1}du$$

$$g(A,C) = -\frac{\Gamma(1-A)\Gamma(C)}{\Gamma(C-A)} = -\frac{\Gamma(C)}{(C-1-A)..(1-A)} \tag{19}$$

sur une courbe fermée C entourant dans le plan complexe les points $u=0$ et $u=1$.

On en déduit en permutant l'intégration sur les variables r et u

$$g(2+in,4) = -\frac{3!}{G(n)},\ G(n) = in(1+n^2),\ I(n,k) = -6\frac{M(n,k)}{G(n)} \tag{20}$$

$$M(n,k) = \frac{1}{2\pi i}\int_C\left[\int_0^\infty \exp[-(1+i\frac{1-2u}{n})\frac{Zr}{a}]J(kr)r^3dr\right](-u)^{1+in}(1-u)^{1-in}du \tag{21}$$

Avec le changement de variable $z = 1-2u$, on a

$$M(n,k) = [\frac{-1}{2\pi i}\int_C\left[\int_0^\infty \exp[-(1+i\frac{z}{n})\frac{Zr}{a}]J(kr)r^3dr\right](z-1)^{1+in}(z+1)^{1-in}dz]/8 \tag{22}$$

où la courbe C entoure maintenant les points $z=-1$ et $z=1$.

On déduit de l'expression (16) de $J(kr)$

$$\int_0^\infty e^{-\mu r}J(kr)r^3dr = \frac{2}{[\mu^2+k^2]^2} \tag{23}$$

$$\mu^2+k^2 = \left[(1+i\frac{z}{n})\frac{Z}{a}\right]^2 + k^2 = \left[\frac{Z}{a}\right]^2([1+i\frac{z}{n}]^2+K^2),\quad K = \frac{ka}{Z} \tag{24}$$

$$M(n,k) = -\frac{2}{8}\left[\frac{an}{Z}\right]^4 N(n,K),\quad N(n,K) = \frac{1}{2\pi i}\int_C f(z)dz \tag{25}$$

$$f(z) = \frac{(z-1)^{1+in}(z+1)^{1-in}}{[z-n(i-K)]^2[z-n(i+K)]^2} \tag{26}$$

Récapitulant (17), (20), (25), on a

$$\mathbf{T}^\perp(\mathbf{k}) = -\frac{4}{\sqrt{3}}\frac{n^4}{4}6\frac{H(n)}{G(n)}N(n,k)\sin\theta_0\mathbf{I} \tag{27}$$

Intégrant sur le contour C et sur un cercle de centre O dont le rayon augmente indéfiniment, on a par l'application du lemme de Jordan et le théorème des résidus

$$N(n,K) = R_+ + R_-,\quad R_\pm = \text{Rés}(f, n(i\pm K)) \tag{28}$$

$$R_\pm = \left[\frac{(z-1)^{1+in}(z+1)^{1-in}}{[z-n(i\pm K)]^2}\right]'_{z=n(i\mp K)} \tag{29}$$

Un calcul sans difficulté montre, la fonction holomorphe $f(z)$ étant choisie dans une détermination convenable, qu'on a

$$R_\pm = \left[\frac{\mp n + i(nK\mp 1)}{\mp n + i(nK\pm 1)}\right]^{in}\left[\frac{\pm(1+n^2+n^2K^2)+i2n^2K}{2n^3K^3}\right] \tag{30}$$

Posant

$$\rho_\pm = [n^2+(nK\pm 1)^2]^{1/2},\quad \Theta_\pm = \cot^{-1}\left[\frac{n}{nK\pm 1}\right],\quad \Theta = \frac{\Theta_+ - \Theta_-}{2} \tag{31}$$

$$\frac{\rho_+}{\rho_-} = e^{\phi} \;\Rightarrow\; \left[\frac{\mp n + i(nK \mp 1)}{\mp n + i(nK \pm 1)}\right]^{in} = [e^{\mp\phi} e^{i2\Theta}]^{in} = e^{-2n\Theta} e^{\mp in\phi} \tag{32}$$

on déduit de (27), (9), (20), (28), (30), (32) la solution

$$\mathbf{T}^{\perp}(\mathbf{k}) = -\frac{\sqrt{3} e^{-2n\Theta}(2n^2 K \cos n\phi - (1 + n^2 + n^2 K^2) \sin n\phi)}{n[1 + n^2]^{1/2}[1 - e^{-2n\pi}]^{1/2} K^3} \sin\theta_0 \mathbf{I} \tag{33}$$

$$K = \frac{ka}{Z}, \quad \Theta = \frac{1}{2}\left(\cot^{-1}\left[\frac{n}{nK+1}\right] - \cot^{-1}\left[\frac{n}{nK-1}\right]\right) \tag{34}$$

$$\phi = \frac{1}{2} \ln\left[\frac{n^2 + (nK+1)^2}{n^2 + (nK-1)^2}\right] \tag{35}$$

Une vérification.

On peut obtenir une vérification de la formule (33) de la façon suivante. On montre aisément par des développements de Taylor que

$$\lim_{K\to 0} [2nK \cos n\phi - (1+n^2+n^2K^2) \sin n\phi] = \frac{8n^4 K^3}{3(1+n^2)^2} \tag{36}$$

On en déduit

$$\lim_{k\to 0} \mathbf{T}^{\perp}(\mathbf{k}) = \mathbf{j}_0^{\perp} = \int \mathbf{j}^{\perp}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{37}$$

$$= -\frac{8n^3 e^{-2n \cot^{-1} n}}{\sqrt{3}[1+n^2]^{3/2}[1 - e^{-2n\pi}]^{1/2}} \sin\theta_0 \mathbf{I}$$

où $\mathbf{j}_0$ est le (demi-)courant total. Or

$$\mathbf{j}_0 = \frac{\hbar}{mc} \int \psi_n \nabla \psi_1 d\mathbf{r} = \frac{E_1 - E}{\hbar c} \int \psi_n \mathbf{r} \psi_1 d\mathbf{r},$$

$$|X_{n1}| = |\int \psi_n \mathbf{r} \psi_1 d\mathbf{r}| \tag{38}$$

$$E - mc^2 = \frac{1}{2n^2} Z^2 \alpha^2 mc^2, \quad mc^2 - E_1 = \frac{1}{2} Z^2 \alpha^2 mc^2$$

On déduit de (8)

$$\frac{E - E_1}{\hbar c} = \left[\frac{1+n^2}{n^2}\right] \frac{Z^2 \alpha^2}{2\alpha a} \tag{39}$$

et l'on obtient la formule (71.4) de [16]

$$|X_{n1}|^2 = \frac{2^8 e^{-4n \cot^{-1} n}}{3(1 - e^{-2n\pi})} \left[\frac{n^2}{1+n^2}\right]^5 \frac{(\alpha a)^2}{(Z\alpha)^4} \tag{40}$$

utilisée dans le calcul de l'effet photoélectrique sans retardation.

Note. Comme l'élément matriciel de la transition, calculé avec retardation, dans un processus d'interaction avec une onde de vecteur de propagation **k** et de vecteur de polarisation **N** (orthogonal à **k**), n'est autre que (voir [16], éq. (59.3), [18], p. 382)

$$D^{\mathbf{k}.\mathbf{N}} = \int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \mathbf{j}^{\perp}(\mathbf{r}).\mathbf{N} d\mathbf{r} = \mathbf{T}^{\perp}(\mathbf{k}).\mathbf{N} \tag{41}$$

on en déduit la formule *exacte* de cet élément matriciel dans le cas de l'effet photoélectrique, en remplaçant dans les formules (33)-(35) K par la valeur telle que $k = (E - E_1)/\hbar c$, c'est à dire

$$K = \left[\frac{1+n^2}{n^2}\right] \frac{Z\alpha}{2} \tag{42}$$

On a ainsi une vérification directe de ce que, pour des valeurs non relativistes de l'énergie et un Z pas trop élevé, la retardation, en ce qui concerne l'effet photoélectrique, peut être considérée comme négligeable.

Comme il est remarqué dans [18] p. 382, il ne servirait d'ailleurs à rien de considérer des valeurs de k trop élevée puisqu'alors on sortirait du domaine non relativiste, et que l'équation de Schrödinger ne pourrait plus être appliquée. Cependant il n'en n'est pas de même dans le cas du décalage de Lamb. *Toutes* les valeurs de k comprises entre 0 et l'infini sont à considérer car elles correspondent à la variable d'intégration d'une expression intégrale du champ de Maxwell, qui, même si la source du champ est un courant de Schrödinger, n'en est pas moins à considérer dans sa globalité.

4 Le calcul non relativiste avec retardation de $1S$

Le calcul de $\mathbf{T}^{\perp}(\mathbf{k}).\mathbf{T}^{\perp}(-\mathbf{k}) = [\mathbf{T}^{\perp}(\mathbf{k})]^2$ fait intervenir $\sin^2\theta_0$ et par suite l'intégration sur toute les directions de **k** introduit dans la formule (1) un facteur $8\pi/3$. Le remplacement dans (1) de $(E - E_1)/\hbar c$ par son expression (39) en fonction de n, puis une intégration (par une méthode numérique) sur k de 0 à l'infini, permet de calculer la contribution $\Delta E_{1\varepsilon}$ au décalage de $1S$ d'un état P_0, ou aussi bien P_+, P_-, du spectre continu d'énergie εmc^2. Puisque $R(r)$ correspond à la normalisation sur l'échelle ε d'énergie, on peut écrire

$$\Delta E_1 = 3(\sum_p \Delta E_{1p} + \int_1^{\infty} \Delta E_{1\varepsilon} d\varepsilon) \tag{43}$$

où p est un entier qui varie de 2 à l'infini, de manière à décrire le spectre discret, où, par (8),

$d\varepsilon = -Z^2\alpha^2 dn/n^3$, et où le facteur 3 provient de ce que ΔE_{1p} et $\Delta E_{1\varepsilon}$ ne correspondent chacun qu'à un seul des trois états P_0, P_+, P_-.

Le calcul de la formule (43), complétant l'étude [9], a été effectué par des voies numériques dans l'étude [3], ainsi que la comparaison avec la formule sans retardation de Bethe [1] avec le cut-off de $kmax = \alpha mc^2/\hbar c$. Il fait apparaître les différences suivantes.

Avec coupure de k à $\alpha mc^2/\hbar c$ des intégrales avec retardation de (1), établies à partir de l'éq. (33), on obtient pour le spectre discret 390 MHz contre 428 MHz, et pour le spectre continu 2863 MHz contre 2869 MHz. (Il faut noter que le nombre 2869 correspond à un calcul direct, effectué dans [3], de la formule de Bethe sans l'approximation $\ln|(E_1 - E_p)/\hbar c + kmax| \simeq \ln kmax$ qui donne 2425 MHz seulement). Ainsi l'estimation de Dyson sur la valeur à donner au cut-off dans l'approximation dipolaire se révèle-t-elle bonne, du moins pour le spectre continu.

Lorsque les intégrales sur k sont considérées jusqu'à l'infini, le calcul avec retardation donne un décalage de 396 + 4750 = 5146 MHz, très éloigné des 8173 MHz de l'expérience. Comme ce calcul est cohérent du point de vue de l'utilisation du champ de Maxwell pour un courant donné, on a une confirmation que la théorie de Schrödinger est insuffisante pour rendre compte du décalage et que le recours à la théorie de Dirac est nécessaire.

Une question intéressante se pose: la différence sur le calcul du décalage des deux théories provient-elle de la partie radiale des fonctions d'onde, ou de leur partie qui fait intervenir les harmoniques sphériques. Autrement dit est-ce vraiment l'incidence des hautes énergies qui fait la différence, ou bien est-ce l'incidence de la retardation sur le caractère très différent des parties harmonique sphérique, liées au spin de l'électron, des fonctions d'onde $P1/2$, $P3/2$ de Dirac? Les études [6] et [7] qui introduisent dans le calcul non relativiste des termes additionnels lié au spin, et qui donnent des résultats assez voisins de l'expérience, semblent faire pencher vers la deuxième hypothèse. La question ne pourra être apportée que par les études ultérieures.

5 Conclusion

Le présent travail qui montre l'insuffisance de la théorie non relativiste, du moins en l'absence de spin, pour le calcul du décalage de Lamb, est le passage préalable à une étude construite sur le même modèle, mais fondée sur la théorie de l'électron de Dirac. Une telle étude, commencée dans [12], si elle est indiscutablement plus complexe, fait appel aux mêmes développements analytiques à savoir la représentation intégrale dans le plan complexe des fonctions hypergéométriques confluentes et l'intégration par la méthode des résidus. A notre avis, son intérêt dépasse le calcul du décalage de Lamb, car elle englobe parmi les processus de transition d'un état lié à un état du spectre continu, en particulier l'effet photoélectrique, tous ceux pour lesquels la retardation ne joue plus un rôle négligeable.

Références

[1] H. Bethe, *Phys. Rev.*, **72**, 339 (1947).
[2] F. Dyson, *Phys. Rev.*, **73**, 617 (1947).
[3] B. Blaive et R. Boudet, soumis à publication.
[4] N. Kroll and W. Lamb, *Phys. Rev.*, **75**, 388 (1949).
[5] J. French and V. Weisskopf, *Phys. Rev.*, **75**, 1240 (1949).
[6] H. Grotch, *Am. J. Phys.*, **49**, 48 (1981).
[7] J. Seke, *Mod. Phys. Lett. B*, **9**, 1289 (1995).
[8] B. Blaive et R. Boudet, *Ann. Fond. L. de Broglie (Paris)*, **14**, 147 (1989).
[9] B. Blaive, A. Barut et R. Boudet, *J. Phys. B*, **9**, 3121 (1991).
[10] J. Seke, *Mod. Phys. Lett. B*, **7**, 1287 (1993).
[11] J. Seke, *Z. Phys. D*, **29**, 1 (1994).
[12] R. Boudet, *Banach Center Publications*, **37**, 337 (1996).
[13] A. Barut and J. Van Huele *Phys. Rev. A*, **32**, 3187 (1985).
[14] R. Boudet, *Found. of Phys. lett.*, **3**, 311 (1990).
[15] R. Boudet, in *New Frontiers in Quantum Electrodynamics and Quantum Optics*, A.O. Barut ed., Plenum Pub. Corp. N.Y., 443 (1990).
[16] H. Bethe and E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one and two-electron Atoms* (Springer, Berlin, 1957).
[17] L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics* vol. 3, Pergamon Press, Oxford, (1971).
[18] H. Hall, *Rev. Mod. Phys.*, **8**, 358 (1936).

(Manuscrit reçu le 16 mai 1997)