

Travaux Dirigés de Mécanique Quantique 1A

(en cours d'écriture)

Guillaume THEMEZE

guillaume.themeze@institutoptique.fr

30 avril 2025

Table des matières

1	Quelle longueur d'onde du laser ?	2
2	Quelle Puissance du laser ?	2
1	Hamiltonien	4
1.1	La jauge	4
2	Le potentiel dipolaire	5
2.1	Calcule du potentiel dipolaire pour la transition $ns \rightarrow np$ et pour les alcalins	5
2.1.1	Polarisation linéaire et $d_0 \equiv \langle nP, m_L = 0 \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} nS, m_L = 0 \rangle$	5
2.1.2	Dans la base fine et $\langle n^2P_{1/2}, m_J = 1/2 \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} n^2S_{1/2}, m_J = 1/2 \rangle = d_0/\sqrt{3}$	6
2.1.3	Potentiel dipolaire	7
2.1.4	Relier Intensité laser et \mathcal{E}	8
3	Relier d_0 à Γ	8
3.1	Courant paramagnétique	8
3.2	Émission et absorption	9
3.2.1	Taux d'émission et d'absorption	9
3.2.2	Dépendance angulaire de la puissance rayonnée	10
3.2.3	Rayonnement dipolaire électrique	10

1 Quelle longueur d'onde du laser ?

La structure interne de l'atome est modélisée par un système à deux niveaux, et la polarisabilité de l'atome est décrite par le modèle classique de Lorentz [9902072]. En utilisant les notations suivantes : ω_0 pour la fréquence propre entre ces deux niveaux et ω pour la fréquence du faisceau laser, lorsque le désaccord est négligeable par rapport à la fréquence du laser ($|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$), le taux d'amortissement classique est donné par :

$$\Gamma(\omega) = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 m_e c^3} \omega^2 \tag{1}$$

Cela conduit à l'expression suivante :

$$\hbar\Gamma_{sc} = \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} U_{dip} \tag{2}$$

où $\Gamma_0 \equiv \Gamma(\omega_0)$.

À partir de cette dernière équation, on peut établir une relation entre la longueur d'onde du laser λ , le potentiel dipolaire U_{dip} et le taux de photons diffusés Γ_{sc} . Si l'on impose les conditions suivantes :

- Le potentiel dipolaire U_{dip} doit être supérieur à $U_{dip,min}$.
- Γ_{sc} pour une valeur de U_{dip} doit être inférieur à $\Gamma_{sc,max}$.

On obtient alors la longueur d'onde maximale λ_{max} que le laser peut avoir :

$$\lambda = \frac{1}{\frac{\Gamma_0}{\Gamma_{sc}} \frac{U_{dip}}{\hbar c} + \frac{1}{\lambda_0}} \leq \frac{1}{\frac{\Gamma_0}{\Gamma_{sc,max}} \frac{U_{dip,min}}{\hbar c} + \frac{1}{\lambda_0}} = \lambda_{max} \tag{3}$$

Nous prenons $U_{dip,0,min}/k_B = 1 \text{ } \mu K$ comme valeur minimale du potentiel dipolaire, et le taux de diffusion des photons pour $U_{dip,min} = U_{dip,0,min}/2 = 500 \text{ } nK \times k_B$ est $\Gamma_{sc,max} = 1 \text{ } s^{-1}$. Nous nous plaçons autour de la transition D_2 du rubidium 87, c'est-à-dire à une **longueur d'onde propre $\lambda_0 = 780 \text{ nm}$ Nous obtenons ainsi $\lambda_{max} = 779,228 \text{ nm}$, ce qui correspond à un décalage de moins de 1 nm.**

2 Quelle Puissance du laser ?

Le potentiel dipolaire s'exprime par l'équation suivante :

$$U_{dip}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} I(\vec{r}) \tag{4}$$

où $I(\vec{r})$ est l'intensité du champ laser. On modélise cette intensité par l'intensité d'un faisceau gaussien :

$$I(\vec{r}) = \frac{2P}{\pi w^2(z)} e^{-\frac{2x^2}{w^2(z)}} \tag{5}$$

avec P la puissance du faisceau laser, $w(z)$ le diamètre du faisceau laser à la position z , w_0 la waist, et $z_R = \pi w_0^2/\lambda$ la longueur de Rayleigh du laser. Étant donné que les atomes se trouvent proches du point focal du faisceau, nous effectuons un développement limité du potentiel dipolaire au premier ordre en x^2/w_0^2 et en z^2/z_R^2 :

$$U_{dip}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} \frac{2P}{\pi w_0^2} \left(1 - \frac{2x^2}{w_0^2} - \frac{z^2}{z_R^2} \right) \tag{6}$$

La hauteur du piège est donnée par :

$$U_{dip,0} = U_{dip}(0,0,0) = \frac{3c^2\Gamma_0}{w_0^2\omega_0^3(\omega - \omega_0)} P \tag{7}$$

En inversant cette équation et en ajoutant la condition sur le potentiel dipolaire minimal $U_{dip,0,min}$, on obtient la puissance minimale du faisceau laser en fonction de sa pulsation :

$$P(\omega) = \frac{w_0^2\omega_0^3(\omega - \omega_0)}{3c^2\Gamma_0} U_{dip,0} \geq \frac{w_0^2\omega_0^3(\omega - \omega_0)}{3c^2\Gamma_0} U_{dip,0,min} = P_{min}(\omega) \tag{8}$$

Nous avons déterminé la longueur maximale λ_{max} du faisceau laser, c'est-à-dire sa pulsation minimale $\omega_{min} \equiv 2\pi c/\lambda_{max}$. Notons $P_{min} \equiv P_{min}(\omega_{min})$ la puissance minimale du faisceau laser pour satisfaire les deux conditions sur la hauteur du potentiel et le taux de

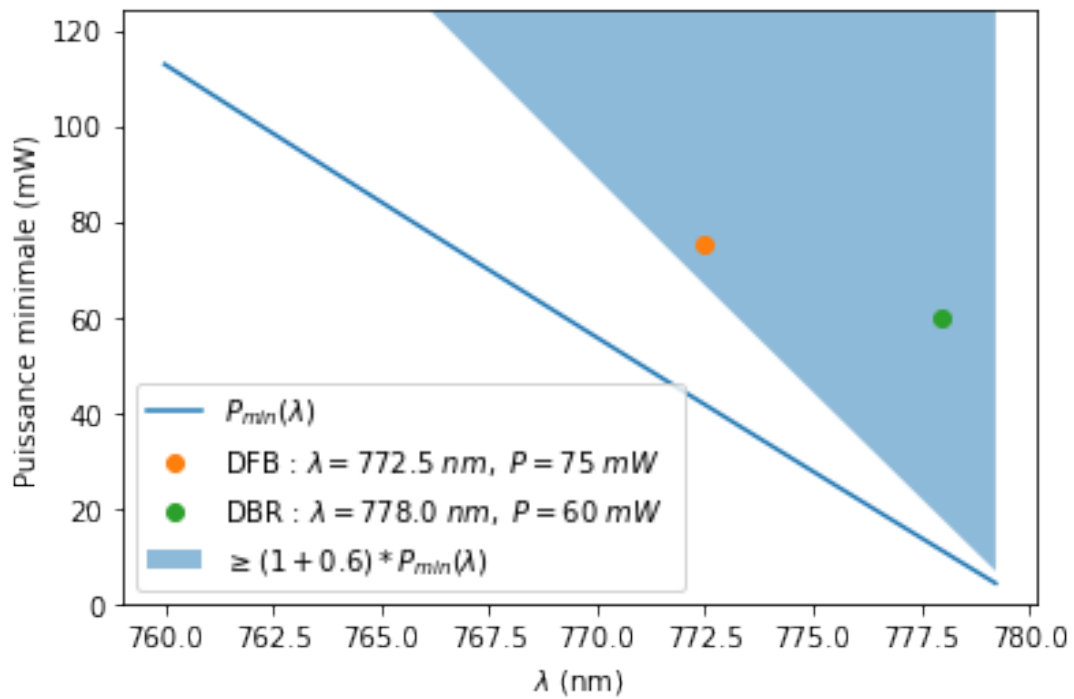


FIGURE 1 – La ligne pleine représente $P_{\min}(\lambda)$ et le fond bleu représente $(1 + 60\%)P_{\min}(\lambda)$

diffusion des photons pour un waist de $w_0 = 300\mu m$. On obtiens $P_{\min} = 4.2$ mW.

http://10.117.51.227:8890/notebooks/analysedata/analyses_jupyter/analyses_Guillaume/Calculs%20puissance%20laser%20.ipynb

Je propose ce laser (chez Toptica-Eagleyard) :

— Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d’onde $\lambda = 772.5$ nm. On note $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$. $P_{\min} = 75.0$ mW

Ref	#LD – 0773 – 0075 – DFB – 1
Wavelength	772.5 nm
Power	75.0 mW
Laser Type	DFB
Operation Mode	?
Quote	?

https://www.toptica.com/fileadmin/Editors_English/14_stocklists/DFB-Stock-list.pdf

— Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d’onde $\lambda = 778.0$ nm. On note $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$. $P_{\min} = 60.0$ mW

Ref	#LD – 0778 – 0060 – DBR – 1
Wavelength	778.0 nm
Power	60.0 mW
Laser Type	DBR
Operation Mode	?
Quote	?

https://www.toptica.com/fileadmin/Editors_English/14_stocklists/DFB-Stock-list.pdf

— Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d’onde $\lambda = 765$ nm. On note $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$. $P_{\min} = 85.0$ mW

Ref	EYP-TPA-0765-01500-3006-CMT03-0000/ EYP-TPA-0765-01500-3006-BTU02-0000
Wavelength	765 nm
Power	1, 5 W
Laser Type	Tapered Amplifier
Operation Mode	CW
Quote	??

[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-cmt03-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application\[\]=spectroscopy](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-cmt03-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application[]=spectroscopy)
[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-btu02-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application\[\]=spectroscopy](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-btu02-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application[]=spectroscopy)

— $\lambda = 770$ nm . $P_{\min} = 55.6$ mW

Ref	EYP-ECL-0770-00080-1500-BFW01-0005
Wavelength	770 nm
Power	80 mW
Laser Type	ECL laser diode
Operation Mode	CW
Quote	?

[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-ecl-0770-00080-1500-bfw01-0005/?_application%5B0%5D=atomic-clock&_application%5B1%5D=cold-atom-interferometry&_application%5B2%5D=metrology&_application\[\]=quantum](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-ecl-0770-00080-1500-bfw01-0005/?_application%5B0%5D=atomic-clock&_application%5B1%5D=cold-atom-interferometry&_application%5B2%5D=metrology&_application[]=quantum)

1 Hamiltonien

1.1 La jauge

(cf Complément HIII du tome 1 du Cohen)

Soit une particule de masse m , couple avec une champs électromagnétique. Dans une jauge $\mathcal{J} \equiv (\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{A}})$ le potentielle vecteur s’écrit $A^\mu = \{A^0 = \Phi/c, A^i = \vec{A}\}$. L’hamiltonien s’écrit :

$$\hat{H}_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{P}} - q\hat{\boldsymbol{A}})^2 + q\hat{\Phi} \tag{9}$$

L’équation de Schrödinger régissant le comportement de la fonction d’onde $|\psi\rangle$ qui décrit maintenant la particule s’écrit

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}_{\mathcal{J}}|\psi\rangle \tag{10}$$

1

Dans une autre jauge \mathcal{J}' le potentielle vecteur s’écrit $A'^\mu = \{A'^0 = \Phi'/c, A'^i = \vec{A}'\}$. On veut que les équation de Maxwell soient encore vérifiés dans la jauge \mathcal{J}' . Pour cela $A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\chi$.² Un moyen assez rapide de s’en assurer est de vérifier que le champs électromagnétique est un invariant de jauge $\{F_{\mu\nu} \doteq \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\} = \{F'_{\mu\nu} \doteq \partial_\mu A'_\nu - \partial_\nu A'_\mu\}$

L’hamiltonien s’écrit :

$$\hat{H}_{\mathcal{J}'} = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{P}} - q\hat{\boldsymbol{A}}')^2 + q\hat{\Phi}' = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{P}} - q\hat{\boldsymbol{A}} - q\hat{\nabla}\chi)^2 + q\hat{\Phi} - q\partial_t\chi \tag{13}$$

3

L’équation de Schrödinger régissant le comportement de la fonction d’onde $|\psi'\rangle$ qui décrit maintenant la particule s’écrit

$$i\hbar\partial_t|\psi'\rangle = \hat{H}_{\mathcal{J}'}|\psi'\rangle \tag{16}$$

avec $|\psi'\rangle = \hat{\boldsymbol{T}}_\chi(t)|\psi\rangle$ et la tranformation unitaire $\hat{\boldsymbol{T}}_\chi(t) = e^{\frac{i}{\hbar}q\chi(\hat{\boldsymbol{R}};t)}$. L’équation de Schrödinger peut être écrite de la même manière, quelle que soit la jauge choisie.⁴

Je choisie $\chi = -\hat{\boldsymbol{R}} \cdot \hat{\boldsymbol{A}}$ (ie $\mathcal{J}' \equiv (\hat{\boldsymbol{A}})$).⁵

1.

Remarque 1.1. Si on écrit

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_\mu = \hat{\partial}_\mu + \frac{iq}{\hbar}\hat{\boldsymbol{A}}_\mu = \left\{ \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_t = \hat{\partial}_t + \frac{iq}{\hbar}\hat{\Phi}; \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_i = \hat{\partial} - \frac{iq}{\hbar}\hat{\boldsymbol{A}} \right\}, \tag{11}$$

L’équation de Schrödinger se réécrit

$$i\hbar\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_t|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}\right)^2|\psi\rangle \tag{12}$$

2. Les potentiels scalaire et vecteur et χ sont des fonction de la position $\hat{\boldsymbol{R}}$ et du temps t . Qui eux sont bien des grangeurs physique véritables donc dont la valeur ne depend pas le la jauge .

3.

Remarque 1.2. Si on écrit

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}'_\mu = \hat{\partial}_\mu + \frac{iq}{\hbar}\hat{\boldsymbol{A}}'_\mu = \left\{ \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}'_t = \hat{\partial}_t + \frac{iq}{\hbar}\hat{\Phi}'; \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}'_i = \hat{\partial} - \frac{iq}{\hbar}\hat{\boldsymbol{A}}' \right\}, \tag{14}$$

L’équation de Schrödinger se réécrit

$$i\hbar\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}'_t|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}'\right)^2|\psi\rangle \tag{15}$$

4. Si on s'interesse au membre de gauche de la dernière équation il vient que?

$$i\hbar\partial_t|\psi'(t)\rangle = \{-q\partial_t\{\chi(\hat{\boldsymbol{X}};t)\} + \hat{H}_{\mathcal{J}}(t)\}|\psi'(t)\rangle \tag{17}$$

avec

$$\hat{H}_{\mathcal{J}}(t) = \hat{\boldsymbol{T}}_\chi(t)\hat{H}_{\mathcal{J}}(t)\hat{\boldsymbol{T}}_\chi^\dagger(t) \tag{18}$$

$$= \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{P}} - q\hat{\boldsymbol{A}} - q\hat{\nabla}\chi)^2 + q\hat{\Phi} \tag{19}$$

5. L’hamiltonien $\tilde{H}_{\mathcal{J}}(t)$ devient

$$\tilde{H}_{\mathcal{J}}(t) = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{P}}^2 + q\hat{\Phi} \tag{20}$$

Ce qui reste coérent avec l’opérateur $\hat{\boldsymbol{T}}_\chi^\dagger(t) = e^{\frac{i}{\hbar}q\hat{\boldsymbol{R}} \cdot \hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{R}};t)}$ qui est un operateur translation de $iq\vec{A}$ dans l’espace des impulsion (cf Complement EII Cohen) :

$$\hat{\boldsymbol{T}}_\chi^\dagger(t)|\vec{p}\rangle = |\vec{p} + iq\vec{A}\rangle, \tag{21}$$

$$\langle\vec{p}'|\hat{\boldsymbol{T}}_\chi(t) = \langle\vec{p}' + iq\vec{A}|. \tag{22}$$

Soit⁶

Et

$$\partial_t \chi = -\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp} \quad (24)$$

avec l'opérateur champs électrique transverse $\hat{\mathbf{E}}_{\perp} = -\partial_t \hat{\mathbf{A}}$. L'hamiltonien $\hat{\mathbf{H}}_{\mathcal{J}'}$ devient :

$$\hat{\mathbf{H}}_{\mathcal{J}'} = \tilde{\mathbf{H}}_{\mathcal{J}} + \hat{\mathbf{V}}_{AR} \quad (25)$$

avec $\tilde{\mathbf{H}}_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 + q\hat{\Phi}$, l'opérateur couplage atome-rayonnement quantifiés $\hat{\mathbf{V}}_{AR} = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp}$ et l'opérateur dipole électrique $\hat{\mathbf{D}} = q\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp}$.

2 Le potentiel dipolaire

L'interaction entre un atome et un champ électrique classique est donnée par l'expression :

$$\vec{E} = \frac{1}{2} \vec{\mathcal{E}} e^{-i\omega t} + \text{cc} = \frac{1}{2} \mathcal{E} \vec{u} e^{-i\omega t} + \text{cc}. \quad (26)$$

où ω est la fréquence angulaire et $\vec{E} = \mathcal{E} \vec{u}$ est l'enveloppe du champ électrique en fréquence positive, où \mathcal{E} et \vec{u} représentent respectivement l'amplitude du champ et le vecteur de polarisation. En général, \mathcal{E} est un scalaire complexe et \vec{u} est un vecteur unitaire complexe.

Nous supposons que le champ lumineux est loin de la résonance avec l'atome. De plus, nous supposons que J est un bon nombre quantique. Cela signifie que nous traitons uniquement les cas où l'énergie d'interaction Stark est petite par rapport à l'écart de structure fine. Dans l'approximation dipolaire, l'interaction entre le champ lumineux et l'atome peut être décrite par l'opérateur

$$\hat{\mathbf{V}}_{AL} = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}} = -\frac{1}{2} \mathcal{E} \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} e^{-i\omega t} - \frac{1}{2} \mathcal{E}^* \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}}^* e^{+i\omega t} \quad (27)$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur du moment dipolaire électrique de l'atome. Lorsque le champ lumineux est loin de la résonance avec l'atome, le décalage Stark ac de second ordre d'un niveau d'énergie atomique non dégénéré $|a\rangle$ est, donné par

$$\delta E_a = -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_b \Re \left(\frac{|\langle b | \vec{D} \cdot \vec{u} | a \rangle|^2}{\omega_b - \omega_a - \omega - i(\gamma_a + \gamma_b)/2} + \frac{|\langle a | \vec{D} \cdot \vec{u} | b \rangle|^2}{\omega_b - \omega_a + \omega + i(\gamma_a + \gamma_b)/2} \right) \quad (28)$$

Ici, $|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont les états propres atomiques avec des énergies non perturbées respectives de $\hbar\omega_a$ et $\hbar\omega_b$, ainsi que des taux de désexcitation spontanée γ_a et γ_b . Le taux de déclin $\gamma_{ba} = \gamma_a + \gamma_b$ correspond à la largeur de transition. Nous pouvons considérer le décalage d'énergie comme une valeur attendue $\delta E_a = \langle a | \hat{\mathbf{V}}_{AL}^{(2)} | a \rangle$, où

$$\hat{\mathbf{V}}_{AL}^{(2)} = \frac{|\mathcal{E}|^2}{4} \left[\left(\hat{\mathbf{u}}^* \cdot \hat{\mathbf{D}} \right) \mathcal{R}_+ \left(\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{D}} \right) + \left(\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{D}} \right) \mathcal{R}_- \left(\hat{\mathbf{u}}^* \cdot \hat{\mathbf{D}} \right) \right], \quad (29)$$

avec

$$\mathcal{R}_+ = -\frac{1}{\hbar} \sum_b \Re \left(\frac{1}{\omega_b - \omega_a - \omega - i\gamma_{ab}/2} \right) |b\rangle \langle b|, \quad (30)$$

$$\mathcal{R}_- = -\frac{1}{\hbar} \sum_b \Re \left(\frac{1}{\omega_b - \omega_a + \omega + i\gamma_{ab}/2} \right) |b\rangle \langle b|. \quad (31)$$

Nous supposons que $\hat{\mathbf{V}}_{AL}^{(2)}$ est l'opérateur pour l'interaction Stark ac, c'est-à-dire qu'il décrit correctement non seulement le décalage des niveaux, mais aussi le mélange des niveaux des états non dégénérés ainsi que dégénérés. Bien que cette hypothèse éclairée n'ait pas été déduite à partir de premiers principes, elle est cohérente avec les résultats de la théorie des perturbations du second ordre pour le décalage Stark en courant continu et avec le formalisme de Floquet pour le décalage Stark en courant alternatif.

2.1 Calcule du potentiel dipolaire pour la transition $ns \rightarrow np$ et pour les alcalins

2.1.1 Polarisation linéaire et $d_0 \equiv \langle nP, m_L = 0 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | nS, m_L = 0 \rangle$

On se limite à une polarisation laser linéaire. Par consequence dans la base $|n, L, m_L\rangle$, il y a uniquement la transition $|nS, m_L = 0\rangle \equiv |n, L = 0, m_L = 0\rangle \rightarrow |nP, m_L = 0\rangle \equiv |n, L = 1, m_L = 0\rangle$. Pour la suite on note $d_0 \equiv \langle nP, m_L = 0 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | nS, m_L = 0 \rangle$

$$\langle \vec{p}' | \hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{X}}(t) \hat{\mathbf{H}}_{\mathcal{J}}(t) \hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{X}}^{\dagger}(t) | \vec{p} \rangle = \left(\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + q\Phi \right) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \quad (23)$$

2.1.2 Dans la base fine et $\langle n^2 P_{1/2}, m_J = 1/2 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2}, m_J = 1/2 \rangle = d_0 / \sqrt{3}$

Le moment angulaire électronique total , $J = S + L$, est la somme du nombre quantique de moment angulaire totale L et du spin totale des électrons. Ici on ne considère juste la couche de valence et on se limete au alcalin donc $S = 1/2$.

Décomposons $|n^2 P_{3/2}, m_J = 1/2 \rangle \equiv |n, J = 3/2, m_J = 1/2 \rangle$ dans la base $|n, m_S, m_L \rangle \equiv |n^2 P, m_S, m_L \rangle \equiv |n, S = 1/2, m_S, L = 1, m_L \rangle$.

On sait que

$$|n, J = 3/2, m_J = 3/2 \rangle = |n, m_S = 1/2, m_L = 1 \rangle \tag{32}$$

or

$$\hat{\mathbf{A}}_{\pm} |n, A, m_A \rangle = \hbar \sqrt{A(A+1) - m_A(m_A \pm 1)} |n, A, m_A \pm 1 \rangle \tag{33}$$

avec l'opérateur $\hat{\mathbf{A}} \in \{\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{J}}, \dots\}$. Donc

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_- |n, J = 3/2, m_J = 3/2 \rangle &= \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{5}{2}\right) - \frac{3}{2} \left(\frac{1}{2}\right)} |n, J = 3/2, m_J = 1/2 \rangle, \\ &= \hbar \sqrt{3} |n, J = 3/2, m_J = 1/2 \rangle. \end{aligned} \tag{34}$$

or

$$\hat{\mathbf{J}}_- = \hat{\mathbf{S}}_- + \hat{\mathbf{L}}_- \tag{35}$$

$$\hat{\mathbf{J}}_- |n, J = 3/2, m_J = 3/2 \rangle = (\hat{\mathbf{S}}_- + \hat{\mathbf{L}}_-) |n, m_S = 1/2, m_L = 1 \rangle, \tag{36}$$

$$\begin{aligned} &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)} |n, m_S = -1/2, m_L = 1 \rangle \\ &+ \hbar \sqrt{1(2) - 1(0)} |n, m_S = 1/2, m_L = 0 \rangle \\ &= \hbar |n, m_S = -1/2, m_L = 1 \rangle \end{aligned} \tag{37}$$

$$+ \hbar \sqrt{2} |n, m_S = 1/2, m_L = 0 \rangle \tag{38}$$

Donc d'après les équations ???

$$|n P_{3/2}, m_J = 1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |n, m_S = -1/2, m_L = 1 \rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |n, m_S = 1/2, m_L = 0 \rangle \tag{39}$$

avec $|n P_J, m_J \rangle \equiv |n, J, m_J \rangle$ et $|n, m_S, m_L \rangle \equiv |n, S = 1/2, m_S, L = 1, m_L \rangle = |n^2 P, m_S, m_L \rangle$.

Pour aussi

$$|n P_{1/2}, m_J = 1/2 \rangle \in \mathbf{Vect}\{|n, m_S = -1/2, m_L = 1 \rangle, |n, m_S = 1/2, m_L = 0 \rangle\} , \tag{40}$$

$$\langle n P_{3/2}, m_J = 1/2 | n P_{1/2}, m_J = 1/2 \rangle = 0 \tag{41}$$

Donc

$$|n P_{1/2}, m_J = 1/2 \rangle = \mp \sqrt{\frac{2}{3}} |n, m_S = -1/2, m_L = 1 \rangle \pm \frac{1}{\sqrt{3}} |n, m_S = 1/2, m_L = 0 \rangle \tag{42}$$

et

$$|n P_{1/2}, m_J = -1/2 \rangle \in \mathbf{Vect}\{|n, m_S = 1/2, m_L = -1 \rangle, |n, m_S = -1/2, m_L = -0 \rangle\} , \tag{43}$$

$$|n P_{3/2}, m_J = -3/2 \rangle = |n, m_S = -1/2, m_L = -1 \rangle \tag{44}$$

et

$$\begin{aligned} \hbar \sqrt{3} |n, J = 3/2, m_J = -1/2 \rangle &\Leftarrow \\ \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{5}{2}\right) - \left(-\frac{3}{2}\right) \left(-\frac{1}{2}\right)} |n, J = 3/2, m_J = -1/2 \rangle &\Leftarrow \\ \hat{\mathbf{J}}_+ |n, J = 3/2, m_J = -3/2 \rangle &\Leftarrow \\ \hat{\mathbf{J}}_+ |n^2 P_{3/2}, m_J = -3/2 \rangle &= (\hat{\mathbf{S}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_+) |n^2 P, m_S = -1/2, m_L = -1 \rangle, \\ &\Rightarrow (\hat{\mathbf{S}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_+) |n, m_S = -1/2, m_L = -1 \rangle, \\ &\Rightarrow \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2}\right) - \left(-\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right)} |n, m_S = 1/2, m_L = -1 \rangle, \\ &+ \hbar \sqrt{1(2) - (-1)(0)} |n, m_S = -1/2, m_L = 0 \rangle, \\ &\Rightarrow \hbar |n, m_S = 1/2, m_L = -1 \rangle \\ &+ \hbar \sqrt{2} |n, m_S = -1/2, m_L = 0 \rangle \end{aligned}$$

soit

$$|n^2 P_{3/2}, m_J = -1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |n^2 P, m_S = 1/2, m_L = -1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |n^2 P, m_S = -1/2, m_L = 0\rangle$$

Or

$$\begin{aligned} |n^2 P_{1/2}, m_J = -1/2\rangle &\in \text{Vect}\{|n^2 P, m_S = 1/2, m_L = -1\rangle, |n^2 P, m_S = -1/2, m_L = 0\rangle\}, \\ \langle n^2 P_{3/2}, m_J = -1/2 | n^2 P_{1/2}, m_J = -1/2 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Soit

$$|n^2 P_{1/2}, m_J = -1/2\rangle = \mp \sqrt{\frac{2}{3}} |n^2 P, m_S = 1/2, m_L = -1\rangle \pm \sqrt{\frac{1}{3}} |n^2 P, m_S = -1/2, m_L = 0\rangle,$$

$$\begin{aligned} |n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2\rangle &= |n^2 S, m_S = \pm 1/2, m_L = 0\rangle \equiv |n^2 S, m_S = \pm 1/2\rangle, \\ |n^2 P_{1/2}, m_J = \pm 1/2\rangle &= \epsilon \sqrt{\frac{2}{3}} |n^2 P, m_S = \mp 1/2, m_L = \pm 1\rangle - \epsilon \sqrt{\frac{1}{3}} |n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = 0\rangle, \\ |n^2 P_{3/2}, m_J = \pm 1/2\rangle &= + \sqrt{\frac{1}{3}} |n^2 P, m_S = \mp 1/2, m_L = \pm 1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = 0\rangle, \\ |n^2 P_{3/2}, m_J = \pm 3/2\rangle &= |n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = \pm 1\rangle, \end{aligned}$$

avec $\epsilon \in \{+1, -1\}$.

Si la polarisation de la lumière est linéaire, cela signifie que les oscillations des champs électriques et magnétiques se produisent dans un seul plan. Dans ce cas, l'opérateur dipôle électronique $\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}}$ n'affectera pas directement les nombres quantiques magnétiques m_L ou m_J , car la polarisation linéaire ne change pas l'orientation du moment angulaire ou du spin m_S de la particule.

$$\begin{aligned} \langle n^2 P_{1/2}, m_J = \pm 1/2 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2 \rangle &= \\ \epsilon \sqrt{\frac{2}{3}} \underbrace{\langle n^2 P, m_S = \mp 1/2, m_L = \pm 1 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 \rangle}_0 &+ \\ -\epsilon \sqrt{\frac{1}{3}} \underbrace{\langle n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 \rangle}_{d_0}, & \\ \langle n^2 P_{1/2}, m_J = \pm 1/2 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2 \rangle &= -\epsilon \sqrt{\frac{1}{3}} d_0 \\ \langle n^2 P_{3/2}, m_J = \pm 1/2 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2 \rangle &= \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \underbrace{\langle n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = \mp 1 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 \rangle}_0 &+ \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \underbrace{\langle n^2 P, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S, m_S = \pm 1/2, m_L = 0 \rangle}_{d_0}, & \\ \langle n^2 P_{3/2}, m_J = \pm 1/2 | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} d_0 \end{aligned}$$

2.1.3 Potentiel dipolaire

En négligeant le temps non-resonant et avec l'hypothèse $|\omega_b - \omega_a - \omega| \gg \gamma_{ab}$ ($V_{AR} = \delta E$) l'équation ??? devient :

$$\begin{aligned} V_{AR} &= -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{|\langle n^2 P_{1/2} | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_1} + \frac{|\langle n^2 P_{3/2} | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{u}} | n^2 S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_2} \right), \\ &= -\frac{d_0^2 |\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right), \end{aligned}$$

avec $\Delta_i = \omega_i - \omega$ avec $i \in \{1, 2\}$ avec $\omega_1 = \omega_{n^2 P_{1/2}, m_J = \pm 1/2} - \omega_{n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2}$ et $\omega_2 = \omega_{n^2 P_{3/2}, m_J = \pm 1/2} - \omega_{n^2 S_{1/2}, m_J = \pm 1/2}$

2.1.4 Relier Intensité laser et \mathcal{E}

La densité d'énergie électromagnétique :

$$u_{em} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 \Re(\vec{E})^2 + \frac{1}{\mu_0} \Re(\vec{B})^2 \right) \quad (45)$$

$$\langle u_{em} \rangle = \frac{\varepsilon_0 \langle \Re(\vec{E})^2 \rangle}{2} + \frac{\langle \Re(\vec{B})^2 \rangle}{2\mu_0} \quad (46)$$

Soit T une application bilinaire ...

$$\langle T(f(t), g(t)) \rangle = \langle T(\Re(\underline{f}e^{i\omega t}), \Re(\underline{g}e^{i\omega t})) \rangle, \quad (47)$$

$$= \left\langle T \left(\frac{1}{2}(\underline{f}e^{i\omega t} + \underline{f}^*e^{-i\omega t}), \frac{1}{2}(\underline{g}e^{i\omega t} + \underline{g}^*e^{-i\omega t}) \right) \right\rangle, \quad (48)$$

$$= \frac{1}{4} (\underline{f} \cdot \underline{g} \langle T(e^{i\omega t}, e^{i\omega t}) \rangle + \underline{f}^* \cdot \underline{g}^* \langle T(e^{-i\omega t}, e^{-i\omega t}) \rangle + (\underline{f}^* \cdot \underline{g} + \underline{f} \cdot \underline{g}^*) \langle T(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \rangle), \quad (49)$$

$$= \frac{1}{2} \Re(\underline{f} \cdot \underline{g}^*) \quad (50)$$

L'équipartition de l'énergie nous donne

$$\varepsilon_0 |\vec{E}|^2 = \frac{1}{\mu_0} |\vec{B}|^2 \quad (51)$$

$$\langle u_{em} \rangle = \frac{\varepsilon_0 |\mathcal{E}|^2}{2} \quad (52)$$

De même pour le vecteur de poyting :

$$\vec{\Pi} = \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{\mu_0} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times (\vec{n}/c \times \vec{E}) \quad (53)$$

$$\langle \vec{\Pi} \rangle = \left\langle \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{\mu_0} \right\rangle = c \langle u_{em} \rangle \vec{n} \quad (54)$$

Donc

$$V_{AR} = -d_0^2 \frac{I}{2\varepsilon_0 c \hbar} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right),$$

avec $I = \frac{c\varepsilon_0 |\mathcal{E}|^2}{2}$

3 Relier d_0 à Γ

3.1 Courant paramagnétique

Dans cette section, nous abordons le concept de courant paramagnétique en relation avec l'interaction entre une particule chargée et un champ électromagnétique. Au lieu de traiter la matière dans le formalisme de la deuxième quantification, nous réservons cette approche aux photons uniquement. La partie matérielle du système sera décrite dans le formalisme habituel de la mécanique quantique (équation de Schrödinger).

Revenons à l'expression (???) de l'hamiltonien d'une particule chargée dans un champ électromagnétique et exprimons-la quantiquement pour un ensemble de particules de même type. Ces particules ont la même masse m et la même charge q (par exemple, un ensemble d'électrons). Elles ont des impulsions \hat{P}_i et des positions \hat{R}_i (opérateurs) :

$$\hat{H}_{J'} = \sum_i \left\{ \frac{\hat{P}_i^2}{2m} - \frac{q}{2m} [\hat{P}_i \cdot \hat{A}'(\hat{R}_i) + \hat{A}'(\hat{R}_i) \cdot \hat{P}_i] + q \overbrace{(\hat{\Phi}(\hat{R}_i) - \partial_t \chi(\hat{R}_i))}^{\hat{\Phi}'(\hat{R}_i)} + \frac{q^2 \hat{A}'^2(\hat{R}_i)}{2m} \right\}, \quad (55)$$

$$= \underbrace{\sum_i \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + q \hat{\Phi}(\hat{R}_i)}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\sum_i \left\{ -q \frac{1}{2m} [\hat{P}_i \cdot \hat{A}'(\hat{R}_i) + \hat{A}'(\hat{R}_i) \cdot \hat{P}_i] + \frac{q^2 \hat{A}'^2(\hat{R}_i)}{2m} - q \partial_t \chi(\hat{R}_i) \right\}}_{\hat{H}_{int} = \hat{V}_{AR} = -\hat{D} \cdot \hat{E}_\perp} \quad (56)$$

Dans cette expression, les potentiels \hat{A}' et $\hat{\Phi}'$ dépendent des opérateurs de position \hat{R}_i de chaque particule, ce qui signifie qu'ils ne commutent pas avec les impulsions \hat{P}_i . Il serait peu pratique de quantifier directement les potentiels. Pour surmonter cette difficulté, nous introduisons l'opérateur du courant paramagnétique et l'opérateur de densité :

$$\hat{\mathbf{J}}(\vec{r}) \equiv \frac{1}{2m} \sum_i \left[\hat{\mathbf{P}}_i \delta(\vec{r} - \hat{\mathbf{R}}_i) + \delta(\vec{r} - \hat{\mathbf{R}}_i) \hat{\mathbf{P}}_i \right] \quad (57)$$

er l'opérateur densité

$$\hat{\mathbf{n}}(\vec{r}) \equiv \sum_i \delta(\vec{r} - \hat{\mathbf{R}}_i) \quad (58)$$

L'hamiltonien d'interaction peut être séparé en trois parties : $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = \hat{\mathbf{H}}_1 + \hat{\mathbf{H}}_2 + \hat{\mathbf{H}}_3$, où

$$\hat{\mathbf{H}}_1 = -q \int d\vec{r} \hat{\mathbf{J}}(\vec{r}) \cdot \hat{\mathbf{A}}'(\vec{r}) \quad (59)$$

$$\hat{\mathbf{H}}_2 = \frac{q^2}{2m} \int d\vec{r} \hat{\mathbf{n}}(\vec{r}) \hat{\mathbf{A}}'^2(\vec{r}), \quad (60)$$

$$\hat{\mathbf{H}}_3 = q \int d\vec{r} \hat{\mathbf{n}}(\vec{r}) \partial_t \chi(\hat{\mathbf{R}}_i). \quad (61)$$

Dans cette expression, les potentiels $\hat{\mathbf{A}}'$ et $\hat{\Phi}'$ commutent (jauge de Coulomb) avec les courants parce qu'ils ne dépendent plus des opérateurs de position des particules. Notons que \vec{r} n'est pas un opérateur dans ces expressions. Après quantification, les potentiels deviennent des opérateurs agissant dans l'espace des états décrivant le champ électromagnétique, qui est distinct de celui décrivant la matière. L'espace d'états total est le produit tensoriel de ces deux espaces.

Il est possible de séparer $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$ en trois parties distinctes : $\hat{\mathbf{H}}_1$, $\hat{\mathbf{H}}_2$ et $\hat{\mathbf{H}}_3$. Cependant, en général, $\hat{\mathbf{H}}_1$ est plus important que $\hat{\mathbf{H}}_2$, ce que nous aborderons plus tard.

En se basant sur le développement en fonctions propres de l'opérateur potentiel vecteur $\hat{\mathbf{A}}'$, nous avons l'expression suivante :

$$\hat{\mathbf{A}}'(\vec{r}) = \sum_{\vec{i}, k} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}} V \varepsilon_0}} \left\{ \hat{\mathbf{a}}_{\vec{i}, k} \hat{\mathbf{e}}_{\vec{i}, k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + cc \right\} \quad (62)$$

L'espace est défini dans une boîte de volume V pour faciliter les calculs de quantités telles que les taux de désintégration et les sections efficaces. Nous supposons également que le potentiel scalaire \hat{U} est une fonction fixée par la distribution de charge du système. Dans les développements qui suivent, nous inclurons U dans l'hamiltonien non perturbé, en supposant que les solutions de ce dernier sont connues. De plus, l'opérateur $\hat{\mathbf{H}}_3$ n'agit pas sur les états du champ électromagnétique. L'interaction quantifiée avec le champ électromagnétique se limite donc aux termes $\hat{\mathbf{H}}_1$ et $\hat{\mathbf{H}}_2$. En général, $\hat{\mathbf{H}}_1$ prédomine sur $\hat{\mathbf{H}}_2$, et les distinctions entre ces deux termes seront clarifiées ultérieurement.

Il n'est pas encore nécessaire d'exprimer $\hat{\mathbf{H}}_2$ en fonction des opérateurs de création et d'annihilation. À ce stade, intéressons-nous à $\hat{\mathbf{H}}_1$ qui peut être formulé comme suit :

$$\hat{\mathbf{H}}_1 = \sum_{\vec{i}, k} \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{\omega_{\vec{k}} V \varepsilon_0}} \left\{ \hat{\mathbf{a}}_{\vec{i}, k} \hat{\mathbf{e}}_{\vec{i}, k} \hat{\mathbf{J}}_{-\vec{k}} + cc \right\}. \quad (63)$$

Nous supposons dans la suite que la matière qui nous intéresse est composée d'électrons portant une charge $q = -e$ où $e > 0$, justifiant ainsi le changement de signe dans $\hat{\mathbf{H}}_1$. De plus, nous avons introduit la transformée de Fourier du courant paramagnétique :

$$\hat{\mathbf{J}}_{\vec{k}} = \int d\vec{r} \hat{\mathbf{J}}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (64)$$

3.2 Émission et absorption

3.2.1 Taux d'émission et d'absorption

Examinons le processus par lequel un atome émet ou absorbe un photon. Pour cela, utilisons la règle d'or de Fermi au premier ordre de la théorie des perturbations, avec l'hamiltonien d'interaction (??). Supposons que l'état initial comporte $n_{\vec{i}, k}$ photons dans le mode de propagation (\vec{i}, \vec{k}) , et que l'atome soit dans un état du spectre discret que nous désignerons par l'indice n . Notons cet état initial du système total $|n; n_{\vec{i}, k}\rangle$. Après le processus, supposons que l'atome soit dans un état noté $|m\rangle$, et que le nombre de photons dans le même mode de propagation soit $n_{\vec{i}, k} \pm 1$. L'état final est donc noté $|m; n_{\vec{i}, k} \pm 1\rangle$. Bien sûr, le signe (+) correspond à l'émission d'un photon, et le signe (-) à l'absorption. Selon la règle d'or de Fermi (règle d'or), le taux de transition est donné par :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m; n_{\vec{i}, k} \pm 1 | \hat{\mathbf{H}}_1 | n; n_{\vec{i}, k} \rangle|^2 \rho_f^\pm, \quad (65)$$

où ρ_f est la densité d'états finaux. En notant E_n et E_m les énergies des états atomiques (ou moléculaires, etc.), et $\omega = c|\vec{k}| \equiv \omega_k$, la fréquence angulaire du photon émis ou absorbé, on a $\rho_f^+ = \int \frac{d\vec{r} d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega)$ et $\rho_f^- = \delta(E_m - E_n \mp \hbar\omega)$.

Notons que les états de rayonnement peuvent contenir un nombre indéterminé de photons dans d'autres modes. Cependant, ici nous nous intéressons à un processus où un seul photon est émis ou absorbé. Les autres photons agissent comme des spectateurs passifs n'ayant aucune influence sur l'amplitude du processus. L'opérateur $\hat{\mathbf{H}}_1$ est une somme sur tous les modes, mais un seul de ces termes contribue à l'amplitude : celui associé au mode $n_{i,k} \rightarrow$. Ce terme est le produit d'un opérateur agissant sur les photons ($\hat{\mathbf{a}}_{i,k}^\dagger \rightarrow$ dans le cas de l'absorption) et d'un opérateur agissant sur l'atome ($\hat{\mathbf{e}}_{i,k} \rightarrow \cdot \hat{\mathbf{J}}_{-k} \rightarrow$ dans le même cas). L'élément de matrice de la partie électromagnétique est facile à évaluer :

$$\langle n_{i,k} \rightarrow + 1 | \hat{\mathbf{a}}_{i,k}^\dagger | n_{i,k} \rightarrow \rangle = \sqrt{n_{i,k} \rightarrow + 1}, \quad \langle n_{i,k} \rightarrow - 1 | \hat{\mathbf{a}}_{i,k} | n_{i,k} \rightarrow \rangle = \sqrt{n_{i,k} \rightarrow}. \quad (66)$$

Les amplitudes pour l'émission et l'absorption sont alors :

absorption :

$$\Gamma_{\text{abs.}} = \frac{\pi e^2}{V \omega \epsilon_0} n_{i,k} \rightarrow |\langle m | \hat{\mathbf{J}}_{-k} \rightarrow \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,k} | n \rangle|^2 \rho_f^- . \quad (67)$$

émission :

$$\Gamma_{\text{em.}} = \frac{\pi e^2}{V \omega \epsilon_0} (n_{i,k} \rightarrow + 1) |\langle m | \hat{\mathbf{J}}_k \rightarrow \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,k}^* | n \rangle|^2 \rho_f^+ . \quad (68)$$

Le plus remarquable dans ces formules est la présence des facteurs $n_{i,k} \rightarrow$ et $n_{i,k} \rightarrow + 1$ qui proviennent de la nature de boson du photon. Ils sont responsables de l'émission et de l'absorption induites de rayonnement : plus le nombre de photons dans l'état initial est grand, plus le processus d'émission ou d'absorption est probable. Ceci est le principe fondamental du fonctionnement des lasers. Il est à noter cependant que l'amplitude de la lumière incidente doit être importante dans un mode donné ($n_{i,k} \rightarrow \gg 1$), c'est-à-dire que la lumière incidente doit être cohérente pour que cet effet se produise. Il est également remarquable que l'émission d'un photon puisse avoir lieu en l'absence d'un photon initial ($n_{i,k} \rightarrow = 0$), c'est-à-dire en l'absence apparente de stimulation externe. Ce processus est appelé émission spontanée, correspondant au rayonnement classique d'une charge accélérée.

3.2.2 Dépendance angulaire de la puissance rayonnée

Examinons maintenant le taux total de transition d'un état atomique excité vers un état d'énergie plus basse, tel que l'état fondamental, par émission spontanée. Cette étape implique de sommer le taux défini dans l'équation (29) sur tous les photons ayant une énergie $\hbar\omega = E_n - E_m$. Cette somme sur les impulsions peut être transformée en une intégrale sur les fréquences selon la relation suivante :

$$\rho_f^+ = \int \frac{d\vec{r} d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) = V \int \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) = V \int \frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \quad (69)$$

Cette intégrale sur les fréquences est évaluée en utilisant la fonction delta en énergie $\delta(E_m - E_n + \hbar\omega)$. Pour effectuer cette évaluation, nous utilisons la propriété $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ et $\int f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$. Nous obtenons alors le taux de désintégration par unité d'angle solide, pour une polarisation donnée :

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \left| \left\langle m \left| \hat{\mathbf{J}}_k \rightarrow \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,k} \right| n \right\rangle \right|^2 \frac{e^2 \omega}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0 \hbar} \quad (70)$$

Le deuxième terme dans cette expression provient de l'intégration de la fonction delta en énergie. Il représente le nombre de photons émis par unité de temps et par unité d'angle solide. En général, nous nous intéressons à la puissance rayonnée par unité d'angle solide, obtenue en multipliant cette expression par l'énergie $\hbar\omega$ du photon :

$$\frac{dP}{d\Omega} = \left| \left\langle m \left| \hat{\mathbf{J}}_k \rightarrow \cdot \hat{\mathbf{e}}_{i,k} \right| n \right\rangle \right|^2 \frac{e^2 \omega^2}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \quad (71)$$

3.2.3 Rayonnement dipolaire électrique

Explorons maintenant le calcul de l'élément de matrice :

$$\int \langle m | \vec{J}_k | n \rangle d\vec{r} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \int \vec{J}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (72)$$

L'élément de matrice $\langle m | \hat{\mathbf{J}}(\vec{r}) | n \rangle$ devient rapidement négligeable lorsque $|\vec{r}|$ dépasse le rayon atomique, car les fonctions d'onde atomiques décroissent exponentiellement pour des distances supérieures au rayon de Bohr. Les seules valeurs de \vec{r} qui contribuent effectivement à l'intégrale sont celles pour lesquelles $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$, étant donné que la longueur d'onde ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$) du photon émis (environ 10^{-7} m) est beaucoup plus grande que la taille de l'atome (environ 10^{-10} m). Ceci est dû au fait que l'énergie au repos mc^2 de l'électron est grande par rapport à son énergie cinétique. Le rapport $\frac{v}{c}$ d'un électron atomique est de l'ordre de la constante de structure fine $\alpha \approx \frac{1}{137.037...}$, caractéristique de la force électromagnétique. Pour une énergie donnée, l'impulsion caractéristique d'un électron atomique est grande (et la distance caractéristique petite) par rapport à celles d'un photon de même énergie.

Nous allons maintenant utiliser l'approximation dipolaire, où nous négligeons complètement le produit $\vec{k} \cdot \vec{r}$, ce qui équivaut à remplacer $\hat{\mathbf{J}}_k$ par $\hat{\mathbf{J}}_0$. Cependant, $\hat{\mathbf{J}}_0$ est simplement la somme des impulsions de tous les électrons de l'atome, c'est-à-dire

$$\hat{\mathbf{J}}_k \stackrel{\text{dip}}{\approx} \hat{\mathbf{J}}_0 = \frac{1}{2m} \sum_i \int d\vec{r} \left(\hat{\mathbf{P}}_1 \delta(\vec{r} - \hat{\mathbf{R}}_i) + \delta(\vec{r} - \hat{\mathbf{R}}_i) \hat{\mathbf{P}}_1 \right) = \frac{1}{m} \sum_i \hat{\mathbf{P}}_i = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} \quad (73)$$

où $\hat{\mathbf{P}}$ est la quantité totale de mouvement.

Maintenant, pour calculer l'élément de matrice $\langle m | \hat{\mathbf{P}} | n \rangle$, nous pouvons utiliser le fait que

$$\hat{\mathbf{P}}_i = \frac{m}{i\hbar} [\hat{\mathbf{R}}_i, \hat{\mathbf{H}}_0] \quad (74)$$

où $\hat{\mathbf{H}}_0$ est l'hamiltonien non perturbé de l'atome (seule l'énergie cinétique contribue à ce commutateur).⁷

Observons que le terme du côté droit de l'expression (74) se révèle être précisément la vitesse $\hat{\mathbf{R}}_i$ de l'électron, conformément à l'équation de mouvement de Heisenberg. À partir de la relation (74), en désignant par \vec{R} la somme des positions des électrons, soit $\hat{\mathbf{R}} = \sum_i \hat{\mathbf{R}}_i$, il devient possible d'écrire :

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}(t)}{m} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{R}}(t), \hat{\mathbf{H}}_0], \quad (79)$$

L'élément de matrice recherché est alors donné par

$$\langle m | \hat{\mathbf{J}}_0 | m \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle m | [\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{H}}_0] | n \rangle = \frac{E_n - E_m}{i\hbar} \langle m | \hat{\mathbf{R}} | n \rangle = \frac{\omega}{i} \langle m | \hat{\mathbf{R}} | n \rangle \quad (80)$$

avec $\hbar\omega = E_n - E_m$.

Si nous définissons l'opérateur du dipôle électrique des électrons comme $\hat{\mathbf{D}} = -e\hat{\mathbf{R}}$, la puissance rayonnée devient

$$\frac{dP}{d\Omega} = |\langle m | \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{i,k}^* | n \rangle|^2 \frac{\omega^4}{8\pi^2 c^3 \varepsilon_0} \quad (81)$$

où $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{i,k}$ est la polarisation du photon émis.

La somme sur les polarisations des photons peut être effectuée comme indiqué précédemment, avec le résultat

$$\left[\frac{dP}{d\Omega} \right]_{\text{non pol}} = \langle m | \hat{\mathbf{R}}_{\perp} | n \rangle \cdot \langle m | \hat{\mathbf{R}}_{\perp} | n \rangle^* \frac{e^2 \omega^4}{8\pi^2 c^3 \varepsilon_0} \quad (82)$$

où $\hat{\mathbf{R}}_{\perp}$ est la projection de $\hat{\mathbf{R}}$ sur le plan perpendiculaire à \vec{k} .

En supposant que les états atomiques m et n ont des nombres quantiques magnétiques nuls ($m = 0$), le moment dipolaire est dirigé le long de l'axe de quantification z , donné par le vecteur unitaire \hat{z} . Nous avons alors $\vec{D} = d_0 \hat{z} = -e \langle m | \hat{\mathbf{Z}} | n \rangle \hat{z}$. En utilisant l'expression de $\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{dP}{d\Omega} \frac{1}{\hbar\omega}$, nous pouvons évaluer l'élément de matrice du dipôle D dans l'équation (81), ce qui nous amène à l'expression de la durée de vie spontanée :

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{8\pi^2 c^3 \varepsilon_0} \sum_i |\hat{z} \cdot \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{i,k}^*|^2 = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{8\pi^2 c^3 \varepsilon_0} \sin^2 \theta \quad (83)$$

8

Lorsque \vec{k} forme un angle θ avec l'axe \hat{z} , en utilisant l'expression $d\Omega = 2\pi \sin(\theta) d\theta$ et le résultat de l'intégrale $\int \sin^3(\theta) d\theta = 4/3$, nous pouvons obtenir le taux total d'émission :

$$\Gamma = \int \frac{d\Gamma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{3\pi c^3 \varepsilon_0 \hbar}. \quad (85)$$

Si nous remplaçons d_0 par $-ea$, où a_0 est le rayon de Bohr, nous obtenons $\frac{\Gamma}{\omega_0} \simeq \alpha \frac{\omega_0^2 a_0^2}{c^2}$ où la structure fine $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137.037...}$ et ω_0 est la fréquence angulaire de l'électron sur son orbite. Or dans l'atome d'hydrogène $\alpha \simeq \frac{\omega_0 a_0}{c}$ ce qui donne $\frac{\Gamma}{\omega_0} \simeq \alpha^3$. Ainsi, la

7. Nous pouvons utiliser le fait que le commutateur $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = 0$ lorsque $\hat{\mathbf{A}}$ et $\hat{\mathbf{B}}$ sont des opérateurs dépendant de coordonnées mutuellement indépendantes. Ainsi, nous pouvons calculer la dérivée temporelle de $\hat{\mathbf{A}}(t)$ avec $\hat{\mathbf{A}}(t) = \exp(i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar) \hat{\mathbf{A}} \exp(-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar)$ en utilisant les résultats de la mécanique quantique :

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{A}}(t)] + \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}(t)}{\partial t}. \quad (75)$$

Si $\hat{\mathbf{A}}(t)$ ne dépend pas explicitement du temps.

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{A}}(t)] \quad (76)$$

Dans notre cas, $\hat{\mathbf{A}}(t) = \hat{\mathbf{R}}_i$ avec $\hat{\mathbf{H}} = \sum_i (\hat{\mathbf{H}}_{0i} + \hat{\mathbf{W}}_{0i})$ ne dépend pas explicitement du temps ; avec $\hat{\mathbf{H}}_0 = \sum_i \hat{\mathbf{H}}_{0i}$ et $\hat{\mathbf{H}}_{int} = \sum_i \hat{\mathbf{W}}_i$. Or $[\hat{\mathbf{R}}_i, \hat{\mathbf{W}}_i] = 0$ donc

$$m \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{R}}_i(t) = \frac{im}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}_0, \hat{\mathbf{R}}_i(t)] \quad (77)$$

donc

$$\hat{\mathbf{P}}_i(t) = \frac{im}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}_0, \hat{\mathbf{R}}_i(t)] \quad (78)$$

8.

$$\sum_{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \perp \vec{k}} |\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \vec{X}|^2 = \vec{X} \cdot \vec{X}^* - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{X})(\vec{k} \cdot \vec{X}^*)}{k^2}. \quad (84)$$

durée de vie associée au processus d'émission spontanée, $\frac{2\pi}{\Gamma}$, est nettement plus longue que la période de révolution d'un électron sur son orbite, $\frac{2\pi}{\omega_0}$.

Classiquement, on a $\Gamma_{cl} = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}\omega^2$. En comparant cette expression avec celle de la mécanique quantique donnée en (85), on constate que $\Gamma = \Gamma_{cl}f_{mn}$, avec $f_{mn} = \frac{2m}{\hbar}\omega_{mn}|\langle m|\hat{\mathbf{Z}}|n\rangle|^2$. Cette grandeur est sans dimension et est désignée sous le nom de force d'oscillateur de la transition.