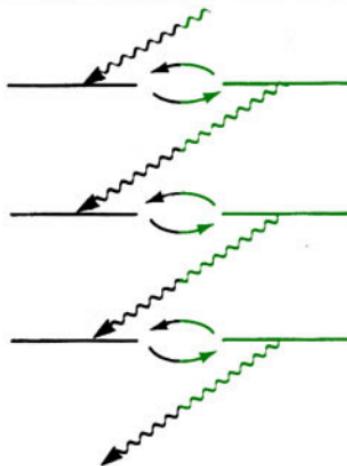


Claude COHEN-TANNOUDJI
Jacques DUPONT-ROC — Gilbert GRYNBERG

Processus d'interaction • entre • photons et atomes



SAVOIRES ACTUELS

Claude Cohen-Tannoudji • Jacques Dupont-Roc • Gilbert Grynberg

Processus d'interaction entre photons et atomes

S A V O I R S A C T U E L S

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

© 2001, **EDP Sciences**, 7 avenue du Hoggar, BP 112, PA de Courtabœuf,
91944 Les Ulis Cedex A.
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

1^{re} édition :
© 1988, 1996 (tirage corrigé) **InterÉditions – CNRS ÉDITIONS**

Tous droits réservés. Aucun extrait de ce livre ne peut être reproduit, sous quelque forme ou par quelque procédé que ce soit (machine électronique, mécanique, à photocopier, à enregistrer ou toute autre) sans l'autorisation écrite préalable des éditeurs.

ISBN 2-86883-358-6
ISBN 2-222-04027-2

Table des matières

<i>Avant-propos</i>	1
<i>Introduction</i>	3

I AMPLITUDES DE TRANSITION EN ÉLECTRODYNAMIQUE

<i>Introduction</i>	7
A. Amplitude de probabilité associée à un processus physique	9
B. Comportement temporel des amplitudes de transition	11
1. Couplage entre états discrets isolés	11
2. Couplage résonnant entre état discret et continuum	13
3. Couplages à l'intérieur d'un continuum ou entre continuums	15
C. Application à l'électrodynamique	17
1. Hamiltonien en jauge de Coulomb	17
2. Développement vis-à-vis des charges q_α	18
3. Développement vis-à-vis de l'interaction avec le champ transverse	19
4. Avantages liés à la prise en compte de l'interaction de Coulomb dans l'hamiltonien des particules	20
5. Représentation diagrammatique des amplitudes de transition	21

COMPLÉMENT A_I - CALCUL PERTURBATIF DES AMPLITUDES DE TRANSITION QUELQUES FORMULES UTILES

<i>Introduction</i>	24
1. Point de vue d'interaction	24
2. Développement perturbatif des amplitudes de transition - <i>a. Développement perturbatif de l'opérateur d'évolution.</i> <i>b. Amplitude de transition d'ordre 1 en V.</i> <i>c. Amplitude de transition d'ordre 2 en V</i>	25

3. Probabilité de transition - <i>a. Calcul de la probabilité de transition vers un état final différent de l'état initial. b. Probabilité de transition entre deux états discrets. Calcul à l'ordre le plus bas en V. c. Cas où l'état final appartient à un continuum d'énergie. Densité d'états. d. Probabilité de transition par unité de temps vers un groupe d'états finals appartenant à un continuum d'énergie. e. Cas où l'état initial et l'état final appartiennent tous deux à un continuum</i>	31
---	----

COMPLÉMENT B_I - DESCRIPTION DE L'EFFET D'UNE PERTURBATION PAR UN HAMILTONIEN EFFECTIF

1. Introduction - But recherché	38
2. Principe de la méthode	41
3. Détermination de l'hamiltonien effectif - <i>a. Calcul de S ordre par ordre. b. Expression de l'hamiltonien effectif à l'ordre 2. c. Termes d'ordre supérieur</i>	42
4. Cas de deux systèmes en interaction	45

COMPLÉMENT C_I - NIVEAU DISCRET COUPLÉ À UN CONTINUUM LARGE ÉTUDE D'UN MODÈLE SIMPLE

<i>Introduction</i>	48
1. Description du modèle - <i>a. Etat discret et continuum. b. Discrétisation du continuum. c. Hypothèses simplificatrices</i>	49
2. Etats stationnaires du système. Souvenir de l'état discret dans le nouveau continuum - <i>a. Equation aux valeurs propres. b. Détermination graphique des nouvelles valeurs propres. c. Densité de présence de l'état discret dans le nouveau continuum</i>	50
3. Quelques applications de ce modèle simple - <i>a. Désintégration de l'état discret. b. Excitation du niveau discret à partir d'un autre état du système. c. Diffusion résonnante via l'état discret. d. Profils de Fano</i>	54
4. Généralisation à des continuums plus réalistes. Diagonalisation de l'hamiltonien sans discrétisation	62

II
**DESCRIPTION QUALITATIVE DE QUELQUES PROCESSUS
 D'INTERACTION ENTRE ATOMES ET PHOTONS**

<i>Introduction</i>	65
A. Processus d'émission : un photon nouveau apparaît	67
1. Emission spontanée entre deux niveaux atomiques discrets. Désintégration radiative d'un niveau atomique excité - <i>a. Représentation diagrammatique. b. Probabilité d'émission spontanée par unité de temps. c. Résultats non perturbatifs</i>	67
2. Emission spontanée entre un état du continuum et un état discret - <i>a. Premier exemple : capture radiative. b. Deuxième exemple : dissociation radiative d'une molécule</i>	71
3. Emission spontanée entre deux états du continuum d'ionisation - Rayonnement de freinage	74
B. Processus d'absorption : un photon disparaît	76
1. Absorption entre deux états discrets	76
2. Absorption entre un état discret et un état du continuum - <i>a. Premier exemple : photoionisation. b. Deuxième exemple : photodissociation</i>	77
3. Absorption entre deux états du continuum d'ionisation : Bremsstrahlung inverse	80
4. Influence de l'état initial du champ sur la dynamique du processus d'absorption	81
C. Processus de diffusion : un photon disparaît et un autre photon apparaît	84
1. Amplitude de diffusion - Représentation diagrammatique.	84
2. Différents types de diffusion d'un photon par un système atomique ou moléculaire - <i>a. Diffusion élastique à basse énergie : diffusion Rayleigh. b. Diffusion inélastique à basse énergie : diffusion Raman. c. Diffusion élastique à haute énergie : diffusion Thomson. d. Diffusion inélastique à haute énergie avec état atomique final dans le continuum d'ionisation : diffusion Compton</i>	86
3. Diffusion résonnante	91
D. Processus multiphotoniques : plusieurs photons apparaissent ou disparaissent	96
1. Emission spontanée à deux photons	96
2. Absorption (et émission induite) multiphotonique entre deux états atomiques discrets	98

3. Ionisation multiphotonique	100
4. Génération d'harmoniques	102
5. Processus multiphotoniques et diffusion quasi résonnante	104
 E. Corrections radiatives : des photons sont émis et réabsorbés (ou absorbés et réémis)	107
1. Corrections radiatives spontanées - <i>a. Cas d'un électron libre : correction de masse. b. Cas d'un électron atomique : largeur naturelle et déplacement radiatif</i>	107
2. Corrections radiatives stimulées	112
 F. Interaction par échange de photons	116
1. Echange de photons transverses entre deux particules chargées : première correction à l'interaction de Coulomb	116
2. Interaction de Van der Waals entre deux atomes neutres - <i>a. Distance faible : $D \ll \lambda_{ab}$. b. Grande distance : $\lambda_{ab} \ll D$</i>	119
 COMPLÉMENT A_{II} - SIGNAUX DE PHOTODÉTECTION ET FONCTIONS DE CORRÉLATION	
<i>Introduction</i>	125
1. Modèles simples de photodétecteurs atomiques - <i>a. Photodétecteur à bande large. b. Photodétecteur à bande étroite</i>	126
2. Probabilité d'excitation et fonctions de corrélation - <i>a. Hamiltonien - opérateur d'évolution. b. Calcul de la probabilité pour que l'atome ait quitté l'état fondamental au bout d'un temps Δt. c. Fonction de corrélation du dipôle atomique. d. Fonction de corrélation du champ</i>	127
3. Photodétection à bande large - <i>a. Condition sur les fonctions de corrélation. b. Probabilité de photoionisation par unité de temps</i>	134
4. Photodétection à bande étroite - <i>a. Condition sur le rayonnement incident et le détecteur. b. Excitation par un spectre de fréquences large. c. Effet de la largeur naturelle du niveau atomique excité</i>	137
5. Signaux de photodétection double - <i>a. Corrélation entre les signaux de deux photodétecteurs. b. Principales étapes du calcul de w_{II}</i>	140

**COMPLÉMENT B_{II} - CORRECTIONS RADIATIVES
DANS LE POINT DE VUE DE PAULI-FIERZ**

<i>Introduction</i>	145
1. La transformation de Pauli-Fierz - <i>a. Hypothèses simplificatrices - Position du problème. b. Champ transverse lié à une particule classique. c. Détermination de la transformation de Pauli-Fierz</i>	146

2. Les observables dans le nouveau point de vue - <i>a. Transformation des champs transverses. b. Transformation des variables dynamiques des particules. c. Expression du nouvel hamiltonien</i>	150
3. Discussion physique - <i>a. Correction de masse. b. Nouvel hamiltonien d'interaction entre particule et champ transverse. c. Avantages du nouveau point de vue. d. Critique de la notion de champ lié à une particule</i> ...	155

III ÉTUDE NON PERTURBATIVE DES AMPLITUDES DE TRANSITION

<i>Introduction</i>	161
A. Opérateur d'évolution et résolvante	163
1. Equation intégrale satisfait par l'opérateur d'évolution	163
2. Fonctions de Green - Propagateurs	163
3. Résolvante de l'hamiltonien	165
B. Resommation formelle de la série de perturbation	168
1. Etude d'un exemple simple - Méthode diagrammatique	168
2. Méthode algébrique utilisant des opérateurs de projection - <i>a. Projecteur sur un sous-espace \mathcal{E}_0 de l'espace des états. b. Calcul de la restriction de la résolvante dans le sous-espace \mathcal{E}_0. c. Calcul des autres restrictions de $G(z)$. d. Interprétation de l'opérateur déplacement</i> ..	170
3. Introduction de quelques approximations - <i>a. Calcul perturbatif de l'opérateur déplacement. Resommation partielle de la série de perturbation. b. Approximation consistant à négliger la dépendance en énergie de l'opérateur déplacement</i>	175
C. Etude de quelques exemples d'application	179
1. Evolution d'un état atomique excité - <i>a. Calcul non perturbatif de l'amplitude de probabilité pour que l'atome reste excité. b. Durée de vie et déplacement radiatifs. c. Conditions de validité du traitement précédent</i>	179
2. Distribution spectrale des photons émis spontanément par un atome excité - <i>a. Élément de matrice de la résolvante associé au processus étudié. b. Généralisation à une cascade radiative. c. Largeur naturelle et déplacement des raies émises</i>	185
3. Couplage indirect entre un niveau discret et un continuum. Exemple de la transition de Lamb - <i>a. Présentation du problème. b. Calcul non perturbatif de l'amplitude de transition. c. Cas d'un couplage faible. Formule de Bethe. d. Cas d'un couplage fort. Oscillation de Rabi</i>	193

4. Couplage indirect entre deux niveaux discrets. Les transitions multiphotoniques - <i>a. Phénomène physique étudié et sous-espace \mathcal{E}_0 des états privilégiés. b. Calcul non perturbatif des amplitudes de transition. c. Cas d'un couplage faible. Probabilité d'excitation à deux photons par unité de temps. d. Cas d'un couplage fort. Oscillation de Rabi à deux photons. e. Transition multiphotonique d'ordre plus élevé. f. Limites du traitement précédent</i>	200
 COMPLÉMENT A_{III} - PROPRIÉTÉS ANALYTIQUES DE LA RÉSOLVANTE	
<i>Introduction</i>	208
1. Analyticité de la résolvante en dehors de l'axe réel	208
2. Etude des singularités sur l'axe réel	210
3. Etats instables et pôles du prolongement analytique	212
4. Intégrale de contour et corrections à la décroissance exponentielle	215
 COMPLÉMENT B_{III} - EXPRESSIONS NON PERTURBATIVES POUR LES AMPLITUDES DE DIFFUSION D'UN PHOTON PAR UN ATOME	
<i>Introduction</i>	217
1. Amplitude de transition entre états non perturbés - <i>a. Utilisation de la résolvante. b. Matrice de transition. c. Application à la diffusion résonnante. d. Insuffisances de l'approche précédente</i>	218
2. Introduction d'états asymptotiques exacts - <i>a. L'atome en l'absence de photons libres. b. L'atome en présence d'un photon libre</i>	224
3. Amplitude de transition entre états asymptotiques exacts - <i>a. Nouvelle définition de la matrice S. b. Nouvelle expression de la matrice de transition. Discussion physique</i>	227
 COMPLÉMENT C_{III} - ÉTAT DISCRET COUPLÉ À UN CONTINUUM DE LARGEUR FINIE TRANSITION ENTRE LA DÉCROISSANCE EXPONENTIELLE DE WEISSKOPF-WIGNER ET L'OSCILLATION DE RABI	
1. Introduction - Idée générale	233
2. Présentation du modèle - <i>a. Etats non perturbés. b. Hypothèses sur le</i>	

<i>couplage. c. Calcul de la résolvante et des propagateurs. d. Transformée de Fourier de l'amplitude $U_b(\tau)$</i>	234
3. Les paramètres physiques importants - <i>a. Fonction $\Gamma_b(E)$. b. Paramètre Ω_1 caractérisant le couplage de l'état discret avec tout le continuum. c. Fonction $\Delta_b(E)$</i>	237
4. Principe de la construction graphique - <i>a. Construction point par point de $\mathcal{U}_b(E)$. b. Détermination graphique des abscisses des maxima de $\mathcal{U}_b(E)$ - Classification des divers régimes</i>	240
5. Couplage faible - <i>a. Décroissance exponentielle de Weisskopf-Wigner. b. Corrections à la décroissance exponentielle</i>	242
6. Couplage intermédiaire - Couplage critique - <i>a. Développement de $\mathcal{U}_b(E)$ au voisinage d'un maximum. b. Sens physique du couplage critique</i>	244
7. Couplage fort	246

IV**LE RAYONNEMENT CONSIDÉRÉ COMME UN RÉSERVOIR :
ÉQUATION PILOTE POUR LES PARTICULES**

A. Introduction - Idée générale	249
B. Etablissement de l'équation pilote d'un petit système \mathcal{A} couplé à un réservoir \mathcal{R}	254
1. Equation d'évolution du petit système en représentation d'interaction	254
2. Hypothèses sur le réservoir - <i>a. Etat du réservoir. b. Valeurs moyennes à un et deux temps des observables de \mathcal{R} couplées à \mathcal{A}</i>	255
3. Calcul perturbatif de la vitesse de variation à gros grains du petit système	258
4. Equation pilote dans la base des états d'énergie du petit système	260
C. Contenu physique de l'équation pilote	264
1. Evolution des populations	264
2. Evolution des cohérences	266
D. Discussion des approximations	269
1. Ordre de grandeur du temps d'évolution de \mathcal{A}	269
2. Condition d'existence de deux échelles de temps	269
3. Condition de validité du développement perturbatif	270
4. Factorisation de l'opérateur densité global à l'instant t	270
5. Récapitulation	272

E. Application à un atome à deux niveaux couplé au rayonnement	273
1. Evolution des degrés de liberté internes - <i>a. Equation pilote décrivant l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux. b. Termes supplémentaires décrivant l'absorption et l'émission induite d'un rayonnement à large bande spectrale et faible intensité</i>	273
2. Evolution des vitesses atomiques - <i>a. Prise en compte des degrés de liberté de translation dans l'équation pilote. b. Equation de Fokker-Planck pour la fonction de distribution des vitesses atomiques. c. Evolution de l'impulsion moyenne et de la dispersion sur les impulsions. d. Distribution stationnaire. Equilibre thermodynamique</i>	279

COMPLÉMENT A_{IV} - FLUCTUATIONS ET RÉPONSE LINÉAIRE APPLICATION AUX PROCESSUS RADIATIFS

<i>Introduction</i>	291
1. Fonctions statistiques et interprétation de l'équation pilote - <i>a. Fonction de corrélation symétrique. b. Susceptibilité linéaire. c. Energie de polarisation et dissipation. d. Interprétation physique du déplacement des niveaux d'énergie. e. Interprétation physique des échanges d'énergie</i>	291
2. Application aux processus radiatifs - <i>a. Calcul des fonctions statistiques. b. Discussion physique. c. Déplacement des niveaux d'énergie dû aux fluctuations du champ de rayonnement. d. Déplacement des niveaux d'énergie dû à la réaction de rayonnement. e. Les échanges d'énergie entre l'atome et le rayonnement</i>	300

COMPLÉMENT B_{IV} - ÉQUATION PILOTE POUR UN OSCILLATEUR HARMONIQUE AMORTI

1. Système physique considéré	309
2. Forme opératorielle de l'équation pilote	310
3. Equation pilote dans la base des états propres de H_A - <i>a. Evolution des populations. b. Evolution de quelques valeurs moyennes</i>	313
4. Equation pilote dans une base d'états cohérents - <i>a. Brefs rappels sur les états cohérents et sur la représentation P_N de l'opérateur densité. b. Equation d'évolution pour $P_N(\beta, \beta^*, t)$. c. Discussion physique</i>	316

**COMPLÉMENT C_{IV} - EQUATIONS DE LANGEVIN
QUANTIQUES POUR UN SYSTÈME PHYSIQUE SIMPLE**

<i>Introduction</i>	321
1. Rappels sur la théorie classique du mouvement Brownien - <i>a. Equation de Langevin. b. Interprétation du coefficient D. Lien entre fluctuations et dissipation. c. Etude de quelques fonctions de corrélation</i>	321
2. Equations de Heisenberg-Langevin pour un oscillateur harmonique amorti - <i>a. Equations de Heisenberg couplées. b. Equation de Langevin et force de Langevin quantiques. c. Lien entre fluctuations et dissipation. d. Moyennes à deux temps mixtes faisant intervenir les forces de Langevin et les opérateurs b et b^+ de \mathcal{A}. e. Vitesses de variation des variances \mathcal{V}_N et \mathcal{V}_A. f. Généralisation de la relation d'Einstein. g. Calcul des moyennes à deux temps des opérateurs de \mathcal{A}. Théorème de régression quantique</i>	327

**V
ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES**

<i>Introduction</i>	337
A. Équations de Bloch optiques pour un atome à deux niveaux	340
1. Description du rayonnement incident	340
2. Approximation des vitesses de variation indépendantes	341
3. Approximation du champ tournant - <i>a. Elimination des termes antirésonnants. b. Forme indépendante du temps des équations de Bloch optiques. c. Autres formes des équations de Bloch optiques</i>	342
4. Représentation géométrique en termes de spin $\frac{1}{2}$ fictif	345
B. Discussion physique - Différences avec d'autres équations d'évolution	348
1. Différence avec des équations de relaxation. Couplages entre populations et cohérences	348
2. Différences avec des équations d'évolution hamiltoniennes	348
3. Différences avec des équations de Heisenberg-Langevin	349
C. Première application - Evolution des valeurs moyennes atomiques	351
1. Degrés de liberté internes - <i>a. Allure du régime transitoire. b. Etude du régime stationnaire. c. Bilan d'énergie. Nombre moyen de photons incidents absorbés par unité de temps</i>	351

2. Degrés de liberté externes. Forces radiatives moyennes - <i>a. Equation du mouvement du centre du paquet d'ondes atomique. b. Les deux types de forces pour un atome initialement immobile. c. Force dissipative. Pression de radiation. d. Force réactive. Force dipolaire</i>	354
D. Propriétés de la lumière émise par l'atome	363
1. Signaux de photodétection et moyennes à un ou deux temps du dipôle émetteur - <i>a. Lien entre le champ rayonné et le dipôle émetteur. b. Expression des signaux de photodétection</i>	363
2. Intensité totale de la lumière émise - <i>a. Proportionnalité à la population du niveau atomique excité. b. Diffusion cohérente et diffusion incohérente. c. Contributions respectives de la diffusion cohérente et incohérente à l'intensité totale émise en régime stationnaire</i>	366
3. Répartition spectrale de la lumière émise en régime stationnaire - <i>a. Contributions respectives de la diffusion cohérente et incohérente - Spectres élastique et inélastique. b. Principe du calcul du spectre inélastique. c. Allure du spectre inélastique dans quelques cas limites</i>	368

COMPLÉMENT A_V - ÉQUATIONS DE BLOCH-LANGEVIN THÉORÈME DE RÉGRESSION QUANTIQUE

<i>Introduction</i>	372
1. Equations de Heisenberg couplées de l'atome et du champ - <i>a. Hamiltonien et base d'opérateurs du système. b. Equation d'évolution des observables de l'atome et du champ. c. Approximation du champ tournant. Changement de variables. d. Comparaison avec le cas de l'oscillateur harmonique</i>	372
2. Etablissement des équations de Heisenberg-Langevin - <i>a. Choix de l'ordre normal. b. Contribution du champ des sources. c. Récapitulation. Discussion physique</i>	377
3. Propriétés des forces de Langevin - <i>a. Relations de commutation entre dipôle atomique et champ libre. b. Calcul des fonctions de corrélation des forces de Langevin. c. Théorème de régression quantique. d. Relations d'Einstein généralisées</i>	382

VI

LA MÉTHODE DE L'ATOME HABILLÉ

A. Introduction : l'atome habillé	389
B. Niveaux d'énergie de l'atome habillé	392
1. Modélisation du faisceau laser	392
2. Etats non couplés du système atome + photons laser	393
3. Le couplage atome-photons laser - <i>a. Hamiltonien d'interaction. b. Couplages résonnants et non résonnantes. c. Périodicité locale du diagramme d'énergie. d. Introduction de la fréquence de Rabi</i>	395
4. Les états propres de l'atome habillé - <i>a. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde. b. Diagramme d'énergie en fonction de $\hbar\omega_L$...</i>	396
5. Manifestations physiques des processus d'absorption et d'émission induite	398
C. La fluorescence de résonance interprétée comme une cascade radiative de l'atome habillé	400
1. Les divers temps caractéristiques du problème	400
2. La cascade radiative dans la base non couplée - <i>a. Evolution temporelle du système. b. Dégroupement de photons. c. Délais entre deux émissions spontanées successives</i>	401
3. La cascade radiative dans la base des niveaux habillés - <i>a. Transitions permises entre niveaux habillés. b. Triplet de fluorescence. c. Corrélations temporelles entre photons de fluorescence filtrés en fréquence</i>	404
D. Equation pilote de l'atome habillé	408
1. Forme générale de l'équation pilote - <i>a. Approximation des vitesses de variation indépendantes. b. Comparaison avec les équations de Bloch optiques</i>	408
2. Equation pilote dans la base des niveaux habillés à la limite séculaire - <i>a. Avantages de la base couplée à la limite séculaire. b. Evolution des populations. c. Evolution des cohérences - Transferts de cohérence. d. Populations réduites et cohérences réduites</i>	410
3. Etat quasi stationnaire pour la cascade radiative - <i>a. Matrice densité initiale. b. Régime transitoire et état quasi stationnaire</i>	415
E. Etude de quelques applications	418
1. Largeurs et poids des diverses composantes du triplet de fluorescence - <i>a. Evolution du dipôle moyen. b. Largeurs et intensités des raies latérales. c. Structure de la raie centrale</i>	418

2. Spectre d'absorption d'un second faisceau laser sonde - <i>a. Problème physique considéré. b. Cas où les deux lasers excitent la même transition. c. Cas où les deux lasers excitent deux transitions partageant un niveau commun - Effet Autler-Townes</i>	422
3. Corrélations de photons - <i>a. Calcul du signal de corrélation de photons. b. Discussion physique. c. Généralisation à un système à trois niveaux : fluorescence intermittente</i>	427
4. Forces dipolaires - <i>a. Niveaux d'énergie de l'atome habillé dans une onde laser inhomogène spatialement. b. Interprétation de la force dipolaire moyenne. c. Fluctuations de la force dipolaire</i>	434

COMPLÉMENT A_{VI} - L'ATOME HABILLÉ DANS LE DOMAINE DES RADIOFRÉQUENCES

<i>Introduction</i>	440
1. Généralités sur les résonances de croisement et d'anticroisement - <i>a. Anticroisement simple sur un système à deux niveaux. b. Anticroisement d'ordre supérieur. c. Croisement de niveaux. Résonance de cohérence</i>	441
2. Spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence - <i>a. Description du système. b. Hamiltonien d'interaction entre l'atome et le champ de radiofréquence. c. Préparation et détection</i>	448
3. Le cas simple des photons de polarisation circulaire - <i>a. Le diagramme d'énergie. b. La résonance magnétique interprétée comme une résonance d'anticroisement de l'atome habillé. c. Résonances de croisement des niveaux habillés</i>	452
4. Photons de radiofréquence de polarisation linéaire - <i>a. Présentation des effets nouveaux. b. Le déplacement de Bloch-Siegert. c. Le spectre impair de résonances d'anticroisement. d. Le spectre pair de résonances de croisement. e. Un calcul non perturbatif: le facteur de Landé de l'atome habillé. f. Evolution qualitative du diagramme d'énergie aux fortes intensités</i>	458

COMPLÉMENT B_{VI} - PROCESSUS COLLISIONNELS EN PRÉSENCE D'IRRADIATION LASER

<i>Introduction</i>	468
1. Relaxation collisionnelle en l'absence d'irradiation laser - <i>a. Hypothèses simplificatrices. b. Equation pilote décrivant l'effet des collisions sur l'atome émetteur</i>	469

2. Relaxation collisionnelle en présence d'irradiation laser - <i>a. Le point de vue de l'atome habillé. b. Evolution des populations : transferts collisionnels entre niveaux habillés. c. Evolution des cohérences. Amortissement et déplacement collisionnels. d. Forme explicite de l'équation pilote à la limite d'impact</i>	472
3. Modifications introduites par les collisions sur l'émission et l'absorption de lumière par l'atome. Redistribution collisionnelle - <i>a. Prise en compte de l'émission spontanée. b. Populations réduites stationnaires. c. Intensité des trois composantes du triplet de fluorescence. d. Interprétation physique à la limite $\Omega_1 \ll \delta_L \ll \tau_{\text{coll}}^{-1}$</i>	478
4. Aperçu sur le calcul du taux de transfert collisionnel - <i>a. Expression du taux de transfert en fonction de la matrice S de collision. b. Cas où la fréquence laser devient résonnante au cours de la collision. Limite des grands désaccords</i>	486

EXERCICES

1. Calcul de la durée de vie radiative d'un niveau atomique excité. Comparaison avec le temps d'amortissement d'un dipôle classique ...	491
2. Emission spontanée par un ion piégé. Effet Lamb-Dicke	494
3. Diffusion Rayleigh	499
4. Diffusion Thomson	503
5. Diffusion résonnante	506
6. Détection optique du croisement de deux niveaux atomiques excités	509
7. Déplacement radiatif d'un niveau atomique. Formule de Bethe pour le déplacement de Lamb	513
8. Rayonnement de freinage. Corrections radiatives à la diffusion élastique par un potentiel	522
9. Rayonnement de freinage de basse fréquence. Etude non perturbative de la « catastrophe infrarouge »	531
10. Modification de la fréquence cyclotron d'une particule par interaction avec le rayonnement	538
11. Interactions magnétiques entre spins	544
12. Modification du moment magnétique d'un atome due à l'interaction avec les fluctuations du champ magnétique du vide	549
13. Excitation d'un atome par un paquet d'ondes : absorption en raie large et en raie étroite	553
14. Emission spontanée d'un ensemble de deux atomes proches. Etats superradiants et états subradiants	558
15. Cascade radiative d'un oscillateur harmonique	563
16. Principe du bilan détaillé	569
17. Equivalence entre un champ quantique dans un état cohérent et un champ extérieur	571

18. Elimination adiabatique des cohérences et transformation des équations de Bloch optiques en équations de relaxation	575
19. Susceptibilité non linéaire pour un ensemble d'atomes à deux niveaux. Etude de quelques applications	578
20. Absorption d'une onde sonde par des atomes soumis à une onde intense. Application à l'absorption saturée	583

APPENDICE – RÉSUMÉ SUR L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE EN JAUGE DE COULOMB

1. Description du champ électromagnétique - <i>a. Champs électrique E et magnétique B. b. Potentiels vecteur A et scalaire U. c. Jauge de Coulomb. d. Variables normales. e. Principe de la quantification canonique en jauge de Coulomb. f. Les champs quantiques en jauge de Coulomb</i>	593
2. Les particules	600
3. Hamiltonien et dynamique en jauge de Coulomb - <i>a. Hamiltonien. b. Hamiltoniens non perturbés et hamiltonien d'interaction. c. Les équations du mouvement</i>	601
4. Espace des états	604
5. Approximation des grandes longueurs d'onde et point de vue dipolaire électrique - <i>a. La transformation unitaire. b. Les grandeurs physiques dans le point de vue dipolaire. c. Induction électrique. d. Hamiltonien dipolaire électrique</i>	606
<i>Liste des ouvrages cités en référence</i>	611
<i>Index</i>	615

Avant-propos

Le développement spectaculaire de nouvelles sources de rayonnement électromagnétique, couvrant un domaine de fréquences allant des ondes radio à l'ultra-violet lointain (lasers, masers, rayonnement synchrotron, sources millimétriques), a renouvelé considérablement l'intérêt porté aux processus d'interaction entre photons et atomes. De nouvelles méthodes sont apparues, permettant d'obtenir des informations de plus en plus précises sur la structure et la dynamique des atomes et des molécules, de contrôler leurs degrés de liberté internes et externes ou de générer de nouveaux types de rayonnements. Ces développements font qu'un nombre croissant de physiciens et de chimistes, de chercheurs et d'ingénieurs, s'intéressent aux processus d'interaction entre matière et rayonnement à basse énergie. L'ambition de cet ouvrage est de mettre à leur disposition les bases théoriques nécessaires pour aborder l'étude de ces processus en partant d'un niveau en mécanique quantique et en électromagnétisme classique correspondant à celui de la maîtrise.

Un tel programme comporte naturellement deux volets. Il faut, d'une part, présenter le cadre théorique permettant de décrire la dynamique quantique du système global « champ électromagnétique + particules chargées non relativistes », discuter le contenu physique de la théorie et les diverses formulations que l'on peut en donner. Ces problèmes sont étudiés dans un volume déjà paru et intitulé « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique ». Il faut, d'autre part, montrer comment un tel cadre théorique permet d'analyser les processus d'interaction entre photons et atomes tels qu'ils apparaissent en physique atomique et moléculaire, en optique quantique et en physique des lasers. Tel est l'objet du présent volume intitulé « Processus d'Interaction entre Photons et Atomes ». Les objectifs de ces deux volumes sont donc clairement distincts et, suivant ses préoccupations ou ses besoins, le lecteur pourra utiliser l'un, l'autre ou les deux volumes de cet ouvrage.

Il est bien sûr exclu de pouvoir présenter dans ce seul volume une étude exhaustive des processus d'interaction entre matière et rayonnement et de tous les phénomènes physiques auxquels ils donnent naissance. Nous avons donc mis l'accent sur les aspects qui nous

semblent essentiels. Tout d'abord, nous analysons en détail les processus élémentaires au cours desquels des photons sont émis, absorbés, diffusés, émis et réabsorbés, échangés par des atomes, en nous aidant au maximum de représentations diagrammatiques qui permettent de visualiser les processus étudiés. La connaissance de ces processus élémentaires n'est cependant pas toujours suffisante pour analyser simplement la très grande variété de phénomènes qui peuvent résulter de l'imbrication de ces processus. Il nous a donc semblé important de regrouper aussi dans cet ouvrage différentes approches théoriques, qui sont généralement dispersées dans des ouvrages plus spécialisés, et qui sont plus particulièrement adaptées à tel ou tel aspect des phénomènes étudiés (méthodes perturbatives, méthode de la résolvante, équation pilote, équation de Langevin, équations de Bloch optiques, méthode de l'atome habillé...). Enfin, nous avons choisi d'illustrer ces méthodes sur des systèmes très simples, de manière à pouvoir dégager aussi clairement que possible leur intérêt et leurs limites. Nous espérons avoir ainsi intégré dans ce volume les éléments de base permettant de dominer la physique de l'interaction matière-rayonnement sous ses divers aspects.

Remerciements

Cet ouvrage s'appuie sur un travail d'enseignement et de recherche qui s'est poursuivi pendant plusieurs années au Collège de France et au Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale Supérieure. Nous tenons ici à exprimer tous nos remerciements à nos collègues et amis, en particulier Serge Reynaud et Jean Dalibard, qui ont directement participé à ces recherches ou qui nous ont fait bénéficier de leurs réflexions.

Nous sommes tout particulièrement reconnaissants à Martine Guillaume qui a assuré la saisie sur traitement de textes du manuscrit et de toutes les équations.

Introduction

L'interaction électromagnétique gouverne les mouvements des électrons et des noyaux qui sont, à l'échelle de l'électron-volt, les constituants élémentaires de la matière. La compréhension des mécanismes d'interaction entre le champ électromagnétique et ces particules est donc fondamentale pour interpréter de très nombreux phénomènes dans notre environnement. Responsable de la cohésion des atomes et des molécules, et de leurs interactions mutuelles, l'interaction électromagnétique est aussi à l'origine de l'émission ou de l'absorption de rayonnement par ces systèmes. L'étude des propriétés de la lumière émise ou absorbée par les atomes et les molécules est d'ailleurs une source essentielle d'informations sur la structure et la dynamique de ces systèmes. Soulignons aussi qu'il est possible d'utiliser les photons pour agir sur les atomes, pour contrôler leurs degrés de liberté aussi bien internes qu'externes et pour les placer dans des situations très éloignées de l'équilibre thermodynamique.

Pour décrire les processus qui mettent en jeu le champ électromagnétique et des atomes ou des molécules, la jauge de Coulomb est particulièrement commode. Rappelons en effet que, dans ce point de vue, l'interaction de Coulomb entre particules chargées, qui est liée à la partie longitudinale du champ électromagnétique et qui est prépondérante à basse énergie, apparaît d'emblée dans l'hamiltonien des particules. Le couplage de ces dernières avec le champ transverse quantifié peut ensuite être analysé de manière perturbative. Une telle formulation présente de nombreux avantages. Tout d'abord, à cause de l'interaction de Coulomb, l'hamiltonien des particules peut posséder des *états liés*. Les atomes, les molécules, et la matière de façon générale, peuvent ainsi être décrits en première approximation de manière simple. Il faut ensuite tenir compte du couplage avec le champ quantique qui est caractérisé par ses excitations élémentaires, les photons. Les échanges d'énergie, d'impulsion et de moment cinétique entre les systèmes de particules et le champ transverse sont alors décrits par des *absorptions* et des *émissions de photons*. Ces processus constituent les processus élémentaires d'interaction entre la matière et le champ transverse.

Il convient toutefois de noter que l'identification des processus élémentaires n'épuise pas le sujet. En effet, l'imbrication de plusieurs de ces processus peut conduire à des effets qualitativement nouveaux. Ainsi, le grand nombre de degrés de liberté du champ est à l'origine de l'apparition de comportements irréversibles dans l'évolution des atomes. Le champ peut apparaître dans ce cas comme un *réservoir* et les méthodes de la mécanique statistique se révèlent alors particulièrement commodes pour décrire l'effet du champ sur les particules. Un autre aspect du champ électromagnétique nécessite une approche particulière : le champ électromagnétique est en effet l'un des rares champs que l'on sache produire dans des états où son amplitude moyenne est non nulle. L'évolution des systèmes atomiques dans un tel *champ cohérent* donne lieu à une grande richesse de comportements qui ont été explorés d'abord à propos de la résonance magnétique avant de l'être dans le domaine optique.

C'est cette variété de comportements et les méthodes théoriques appropriées pour en rendre compte qui sont exposées dans les six chapitres qui constituent ce livre. Le premier chapitre rappelle la notion d'amplitude de transition, qui est essentielle pour la description quantique d'un processus d'interaction entre photons et atomes. Les états importants des particules et du champ sont identifiés, et on introduit des représentations diagrammatiques permettant de visualiser les processus étudiés. Le chapitre II présente une vue d'ensemble sur les interactions entre atomes et photons. Les divers processus élémentaires sont passés en revue et analysés en termes d'amplitudes de transition : absorption, émission, diffusion de photons, corrections radiatives et échanges de photons. Ces processus sont illustrés sur de nombreux exemples choisis dans des contextes variés. Le chapitre III reprend le problème du calcul des amplitudes de transition avec un outil plus puissant que la théorie des perturbations, la résolvante. Nous montrons comment il est possible d'obtenir des expressions non perturbatives des amplitudes de transition, en particulier pour la décroissance d'un état instable ou pour la diffusion résonnante. À partir du chapitre IV, on ne cherche plus à déterminer l'évolution de l'ensemble « champ + particules », mais seulement celle de l'atome. Nous montrons dans le chapitre IV que, pour de nombreux états du champ, l'évolution de l'atome peut être décrite par une équation de relaxation pour la matrice densité de l'atome (ou par une équation de Langevin pour ses observables). De nombreux résultats sont également établis sur le mouvement et les fluctuations des observables internes et externes de l'atome. Dans le chapitre V, on tient compte en plus de l'effet d'un rayonnement monochromatique cohérent, éventuellement intense, qui perturbe de façon importante l'évolution atomique. Cette dernière peut être décrite, moyennant certaines approximations, par les

équations de Bloch optiques, dans lesquelles l'effet du champ cohérent est décrit comme une perturbation dépendant du temps. Les équations de Bloch optiques constituent, avec les équations de Maxwell, les équations de base pour analyser de nombreuses situations physiques. Enfin, le chapitre VI reprend le même problème dans le point de vue de « l'atome habillé » qui utilise une description quantique du mode du champ ayant une amplitude macroscopique. Ce point de vue permet de faire ressortir clairement le rôle joué par les processus fondamentaux d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée discutés au chapitre II, et se révèle très commode pour interpréter de nombreux phénomènes se produisant en présence de rayonnement intense.

Comme dans l'autre volume « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », chaque chapitre est complété par des compléments qui ont diverses fonctions ; ils peuvent préciser des notions introduites dans le chapitre ou le prolonger en présentant des exemples d'applications ; ils peuvent également proposer d'autres points de vue ou aborder des problèmes annexes. Une bibliographie succincte, non exhaustive, est donnée, soit sous forme de références générales à la fin des chapitres et éventuellement des compléments, soit sous forme de références plus spécifiques mentionnées dans des notes en bas de page. Les livres sont cités simplement par le nom des auteurs sauf « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique » qui l'est par son titre. Pour éviter des références trop fréquentes à ce livre, nous avons rassemblé dans un *appendice* les éléments essentiels de la description de l'électrodynamique en jauge de Coulomb. Ce formulaire a toutefois un caractère très succinct, et le lecteur est invité à se référer à l'ouvrage mentionné plus haut pour toutes les questions relatives aux fondements de la théorie. Enfin, nous avons regroupé à la fin de ce volume une vingtaine d'exercices corrigés, qui illustrent tel ou tel aspect de l'interaction entre matière et rayonnement. Au prix de quelques redites, nous les avons rendus suffisamment autonomes pour qu'ils puissent en général être abordés indépendamment de la lecture détaillée de tel ou tel chapitre.

Pour une première approche simple, le lecteur pourrait se contenter des chapitres I, II et V, et admettre, après avoir parcouru la partie A du chapitre IV, l'existence des vitesses de relaxation. Il aurait ainsi une vue d'ensemble sur les processus élémentaires et serait familiarisé avec les méthodes simples de calcul des amplitudes de transition ainsi qu'avec les équations de Bloch optiques.

Avertissement

Selon un usage courant, le terme « rayonnement » est utilisé de façon assez générale pour désigner le champ transverse, bien qu'il ne coïncide

avec ce dernier qu'en l'absence de particules chargées. Par ailleurs, les fréquences propres des atomes ou du champ sont systématiquement repérées par les *pulsations* ω correspondantes. Etant donné l'usage peu courant de ce dernier terme, nous continuons à utiliser le mot de fréquence pour les désigner.

CHAPITRE I

Amplitudes de transition en électrodynamique

Le but de ce premier chapitre est d'introduire la notion d'amplitude de transition qui est essentielle pour la description quantique des processus d'interaction entre atomes et photons.

Nous commençons, dans la partie A, par rappeler que l'amplitude de probabilité associée à un processus physique est l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution entre l'état initial et l'état final du processus étudié. Le calcul de ces amplitudes utilise souvent la théorie des perturbations et repose sur la décomposition de l'hamiltonien total H en une partie non perturbée H_0 et un couplage V .

Nous rappelons ensuite, dans la partie B, des notions de base de mécanique quantique sur le comportement temporel des amplitudes de transition. Plusieurs cas sont distingués suivant que les états initial et final du processus étudié appartiennent au spectre discret ou continu de H_0 . La discussion qualitative de cette partie B est approfondie dans trois compléments. Le complément A_1 regroupe quelques résultats importants relatifs au calcul perturbatif des amplitudes de transition et des grandeurs physiques qui peuvent être déduites de ces amplitudes (probabilités de transition par unité de temps, sections efficaces...). Le complément B_1 introduit la notion d'hamiltonien effectif, utile pour décrire des situations où plusieurs niveaux d'énergie de H_0 , formant une multiplicité bien isolée, sont couplés indirectement via d'autres niveaux de H_0 . Le complément C_1 présente un modèle très simple d'état discret couplé à un continuum, permettant de calculer exactement les amplitudes de transition et de comprendre comment se manifeste le « souvenir » de l'état discret de H_0 dans les états propres de H .

Dans la partie C, nous analysons enfin la façon dont ces notions peuvent être appliquées au cas d'un système de particules chargées

interagissant avec le champ électromagnétique. Partant de l'hamiltonien H de l'électrodynamique quantique en jauge de Coulomb, nous envisageons plusieurs décompositions possibles de cet hamiltonien en une partie non perturbée H_0 et un couplage V . Nous soulignons à cette occasion les avantages de la jauge de Coulomb qui permet de prendre en compte l'interaction de Coulomb dans l'hamiltonien des particules et de considérer comme « non perturbés » des états *liés* de particules chargées comme des atomes, des molécules ou des ions. Nous introduisons également des représentations diagrammatiques des processus d'interaction permettant de visualiser simplement l'évolution du système global. Ce sont ces processus d'interaction (absorption, émission, diffusion...) que nous passerons en revue dans le chapitre II.

A – AMPLITUDE DE PROBABILITÉ ASSOCIÉE A UN PROCESSUS PHYSIQUE

La notion d'amplitude de probabilité joue un rôle central dans la description quantique du déroulement temporel d'un processus physique. Le système étudié est préparé à l'instant t_i dans un certain état $|\psi_i\rangle$. L'amplitude de probabilité de le trouver, à un autre instant t_f , dans l'état $|\psi_f\rangle$ est donnée, dans le point de vue de Schrödinger, par :

$$\langle \psi_f | U(t_f, t_i) | \psi_i \rangle \quad (\text{A.1})$$

où $U(t_f, t_i)$ est l'opérateur d'évolution entre t_i et t_f . L'intérêt des amplitudes (A.1) est qu'elles se multiplient : l'amplitude d'aller de $|\psi_1\rangle$ à $|\psi_2\rangle$ entre t_1 et t_2 , puis de $|\psi_2\rangle$ à $|\psi_3\rangle$ entre t_2 et t_3 , est donnée par le produit :

$$\langle \psi_3 | U(t_3, t_2) | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | U(t_2, t_1) | \psi_1 \rangle \quad (\text{A.2})$$

Une autre propriété intéressante des amplitudes (A.1) est qu'elles interfèrent. Si le système n'est pas observé à l'instant intermédiaire t_2 , les amplitudes associées à tous les états intermédiaires possibles doivent être sommées. Il est bien connu en effet que :

$$\begin{aligned} \langle \psi_3 | U(t_3, t_1) | \psi_1 \rangle &= \\ &= \sum_n \langle \psi_3 | U(t_3, t_2) | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | U(t_2, t_1) | \psi_1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

où les $\{|\varphi_n\rangle\}$ forment une base orthonormée d'états.

Le calcul de l'amplitude (A.1) suppose bien sûr que l'on sache tout d'abord déterminer $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$. L'état initial et l'état final sont caractérisés par des valeurs bien définies de certaines grandeurs physiques. Il faut donc pouvoir calculer les valeurs propres et états propres des observables qui représentent ces grandeurs physiques. Par ailleurs, la détermination de l'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$ passe par la diagonalisation de l'hamiltonien H du système. Or, il se trouve que dans la plupart des cas, et notamment en électrodynamique, on ne sait pas calculer de manière exacte les états propres et valeurs propres de H . Il est donc nécessaire d'avoir recours à des méthodes d'approximation.

Le calcul perturbatif des amplitudes (A.1) repose en général sur la décomposition de l'hamiltonien H en une partie « non perturbée » H_0 , dont les états propres $|\varphi_n\rangle$ et les valeurs propres E_n sont connus, et une perturbation $V = H - H_0$:

$$H = H_0 + V \quad (\text{A.4})$$

Comme tout état $|\psi_i\rangle$ ou $|\psi_f\rangle$ peut toujours être développé sur la base $|\varphi_n\rangle$ des états propres de H_0 , les amplitudes (A.1) peuvent être exprimées en fonction des quantités :

$$\langle \varphi_p | U(t_f, t_i) | \varphi_n \rangle \quad (\text{A.5})$$

qui représentent les amplitudes de transition induites par la perturbation V entre états non perturbés. Dans ce chapitre, nous nous intéresserons à ces amplitudes de transition et à leur calcul sous forme d'un développement perturbatif en puissances de V .

Quand le problème étudié peut être posé en termes de collisions, il est très commode de « brancher » et de « débrancher » adiabatiquement la perturbation V , en multipliant formellement V par un paramètre $\lambda(t)$ dont les variations temporelles sont représentées sur la figure 1. On « simule » ainsi l'arrivée l'un sur l'autre de deux paquets d'onde qui, au début ($t \leq t_i$), n'interagissent pas parce qu'ils sont trop éloignés l'un de l'autre, et qui, après la collision ($t \geq t_f$), se séparent à nouveau et n'interagissent plus. La limite de l'expression (A.5), quand la durée T de la collision (voir figure 1) tend vers l'infini, n'est autre qu'un élément de la matrice S de diffusion. (L'opérateur d'évolution U doit être alors pris en représentation d'interaction par rapport à H_0 pour éliminer les exponentielles d'évolution libre en t_i et en t_f dues à H_0 ; voir complément A_I , § 1).

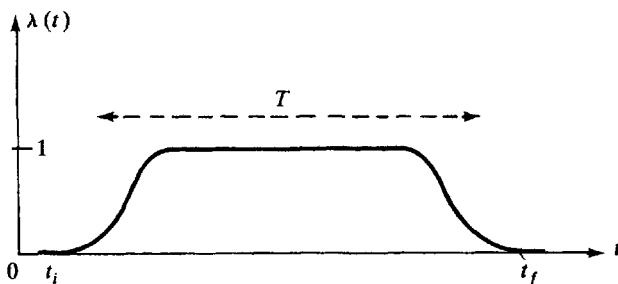


Figure 1. Variations temporelles du paramètre $\lambda(t)$ permettant de brancher et de débrancher adiabatiquement la perturbation V et de simuler ainsi une collision de durée T .

B – COMPORTEMENT TEMPOREL DES AMPLITUDES DE TRANSITION

Pour donner une idée du type d'informations physiques qui peuvent être extraites des amplitudes de probabilité précédentes, nous allons distinguer différents cas, suivant que les états initial et final $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ du processus étudié appartiennent au spectre discret ou continu de l'hamiltonien non perturbé H_0 . Pour chacun de ces cas, nous rappellerons les comportements temporels que la mécanique quantique prédit pour les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution, et nous indiquerons comment il est possible de relier les amplitudes de probabilité à des grandeurs physiques mesurables comme des déplacements de niveaux, des durées de vie, des sections efficaces... Nous aurons ainsi dégagé quelques idées générales qui seront utiles pour l'analyse des processus physiques passés en revue dans le chapitre II.

1. Couplage entre états discrets isolés

Commençons par considérer le cas où l'hamiltonien non perturbé H_0 possède un ou plusieurs états propres discrets bien isolés de tous les autres états propres de H_0 .

Un cas particulièrement simple est celui d'un *seul* état discret $|\varphi_1\rangle$, bien isolé, d'énergie non perturbée E_1 . Considérons alors l'amplitude :

$$\tilde{U}_{11}(T) = \langle \varphi_1 | \tilde{U}(T) | \varphi_1 \rangle \quad (\text{B.1.a})$$

où

$$\tilde{U}(T) = e^{iH_0T/2\hbar} U(T) e^{iH_0T/2\hbar} \quad (\text{B.1.b})$$

est l'opérateur d'évolution entre les instants $t_i = -T/2$ et $t_f = +T/2$ en représentation d'interaction par rapport à H_0 (voir complément A₁, § 1). $\tilde{U}_{11}(T)$ représente l'amplitude de probabilité pour que le système, préparé dans l'état $|\varphi_1\rangle$ à l'instant initial t_i , y soit encore un instant T après. En insérant à droite ou à gauche de $U(T) = \exp(-i HT/\hbar)$ la relation de fermeture sur les états propres de H , on voit apparaître une superposition d'exponentielles de T , dont l'une a un poids nettement prépondérant (d'ordre 0 en V) :

$$\tilde{U}_{11}(T) \simeq |\langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle|^2 e^{-i\delta E_1 T/\hbar} \quad (\text{B.2})$$

Dans (B.2), $|\psi_1\rangle$ est l'état propre de H qui tend vers $|\varphi_1\rangle$ quand V tend vers zéro et δE_1 le déplacement de l'état $|\varphi_1\rangle$ dû au couplage

V , donné par le développement perturbatif bien connu :

$$\delta E_1 = \langle \varphi_1 | V | \varphi_1 \rangle + \sum_{n \neq 1} \frac{\langle \varphi_1 | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | V | \varphi_1 \rangle}{E_1 - E_n} + \dots \quad (\text{B.3})$$

L'étude de l'amplitude (B.1.a) permet donc de calculer des déplacements de niveaux. Remarquons d'ailleurs qu'il suffit de connaître, dans le développement de l'amplitude (B.2), le terme linéaire en T pour obtenir δE_1 . Nous rencontrerons dans la suite des situations de ce type à propos de l'étude du déplacement radiatif de niveaux atomiques dû à l'émission et à la réabsorption virtuelles d'un photon.

Un autre cas intéressant est celui où H_0 possède deux états discrets, bien isolés des autres, $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$, de même énergie non perturbée $E_1 = E_2$. Considérons alors l'amplitude :

$$\tilde{U}_{21}(T) = \langle \varphi_2 | \tilde{U}(T) | \varphi_1 \rangle \quad (\text{B.4})$$

qui permet de calculer la probabilité :

$$P_{21}(T) = |\tilde{U}_{21}(T)|^2 \quad (\text{B.5})$$

pour que le système, initialement dans l'état $|\varphi_1\rangle$, passe au bout d'un temps T dans l'état $|\varphi_2\rangle$. Il est bien connu en mécanique quantique (problème à deux niveaux) que $P_{21}(T)$ présente un caractère oscillant. La fréquence de cette oscillation réversible du système entre $|\varphi_2\rangle$ et $|\varphi_1\rangle$, appelée « *fréquence de nutation de Rabi* », est proportionnelle au couplage introduit par V entre $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$, soit directement (si $\langle \varphi_2 | V | \varphi_1 \rangle$ est non nul), soit indirectement (si $\langle \varphi_2 | V | \varphi_1 \rangle$ est nul) via d'autres niveaux éloignés de $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ (voir complément B_I). Des exemples de telles situations apparaissent dans les interactions entre un système atomique et une onde monochromatique intense (voir complément A_{VI}).

Si plusieurs états propres discrets de H_0 sont proches les uns des autres (en formant un groupe suffisamment bien éloigné de tous les autres niveaux de H_0), les probabilités de transition de l'un à l'autre de ces niveaux sont des superpositions d'oscillations de Rabi avec des amplitudes et des fréquences différentes. A la limite où le nombre d'états couplés les uns aux autres devient très grand, les battements entre ces diverses oscillations de Rabi finissent par donner un caractère irréversible à l'évolution du système. C'est ce que nous allons étudier maintenant en considérant des couplages qui font intervenir un continuum d'états propres de H_0 .

2. Couplage résonnant entre état discret et continuum

Nous supposons dans ce paragraphe qu'un état discret $|\varphi_i\rangle$, d'énergie E_i , est couplé par V à un continuum $|\varphi_f\rangle$ d'états propres de H_0 (l'énergie E_f de $|\varphi_f\rangle$ varie continûment).

Le calcul de l'amplitude de probabilité $\langle\varphi_f|\tilde{U}(T)|\varphi_i\rangle$ est bien connu en mécanique quantique. A l'ordre le plus bas en V , c'est-à-dire à l'ordre 1, on trouve (voir complément A_I , § 2-b) :

$$\tilde{U}_{fi}(T) = \langle\varphi_f|\tilde{U}(T)|\varphi_i\rangle \simeq \delta_{fi} - 2\pi i \delta^{(T)}(E_f - E_i) V_{fi} + \dots \quad (\text{B.6})$$

où $V_{fi} = \langle\varphi_f|V|\varphi_i\rangle$ est l'élément de matrice de V entre $|\varphi_f\rangle$ et $|\varphi_i\rangle$, et où $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ est une fonction delta de largeur \hbar/T , qui exprime la conservation de l'énergie non perturbée à \hbar/T près (incertitude liée à la durée T de l'interaction). En fait, $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ est la transformée de Fourier du produit d'une exponentielle de fréquence $(E_f - E_i)/\hbar$ par un créneau de largeur T . Pour obtenir la probabilité de transition de $|\varphi_i\rangle$ vers $|\varphi_f\rangle$, il faut prendre le carré du module de (B.6). Comme les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ sont par hypothèse différents, le premier terme de (B.6), δ_{fi} , est nul. Par ailleurs, le carré de $\delta^{(T)}$ est proportionnel à $T\delta^{(T)}$ (voir complément A_I , équation (49)). La probabilité de transition de $|\varphi_i\rangle$ vers $|\varphi_f\rangle$ est donc proportionnelle à la durée T de l'interaction, ce qui permet de définir une probabilité de transition par unité de temps qu'on trouve égale à :

$$w_{fi} = \frac{1}{T} |\tilde{U}_{fi}(T)|^2 \simeq \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta^{(T)}(E_f - E_i) \quad (\text{B.7})$$

En fait, l'état final $|\varphi_f\rangle$, qui appartient à un spectre continu, n'est pas normalisable. La quantité qui a un sens physique est la probabilité de transition par unité de temps vers un groupe d'états finals. Par exemple, la somme de (B.7) sur tous les états $|\varphi_f\rangle$ donne la probabilité de transition par unité de temps, Γ , de l'état discret $|\varphi_i\rangle$ vers un état quelconque du continuum :

$$\Gamma = \sum_f w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i) \quad (\text{B.8})$$

où ρ est la densité d'états finals évaluée en $E_f = E_i$ (règle d'or de Fermi).

Une autre quantité intéressante est la probabilité $|\tilde{U}_{ii}(T)|^2$ pour que le système soit resté dans l'état discret $|\varphi_i\rangle$ au bout d'un temps T . Le calcul perturbatif précédent donne (conservation de la norme) :

$$|\tilde{U}_{ii}(T)|^2 = 1 - \sum_f |\tilde{U}_{fi}(T)|^2 \simeq 1 - \Gamma T \quad (\text{B.9})$$

La probabilité de trouver le système dans l'état $|\varphi_i\rangle$ décroît donc proportionnellement à Γ . En fait, un calcul non perturbatif de l'amplitude $\tilde{U}_{ii}(T)$, sur lequel nous reviendrons dans le chapitre III, est possible (*). Il donne :

$$\tilde{U}_{ii}(T) = e^{-\Gamma T/2} e^{-i\delta E_i T/\hbar} \quad (\text{B.10})$$

ce qui montre que l'état discret se désintègre exponentiellement au cours du temps avec une « *durée de vie* » :

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad (\text{B.11})$$

(La probabilité $|\tilde{U}_{ii}(T)|^2$ décroît en effet en $\exp(-\Gamma T) = \exp(-T/\tau)$). On voit apparaître également un déplacement δE_i de l'état discret dû au couplage avec le continuum, et dont l'expression est :

$$\delta E_i = \mathcal{P} \sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E_i - E_f} \quad (\text{B.12})$$

où \mathcal{P} signifie partie principale. Il apparaît ainsi clairement que l'étude des amplitudes de transition faisant intervenir un état discret et un continuum donne accès à des grandeurs physiques importantes comme des durées de vie ou des déplacements de niveau. Nous discuterons dans le chapitre II un exemple important de situation de ce type, l'émission spontanée de rayonnement par un état atomique excité discret.

Remarque

La décroissance exponentielle de $|\tilde{U}_{ii}(T)|^2$ est un exemple simple de comportement irréversible dû à la superposition d'un très grand nombre d'oscillations de Rabi de fréquences différentes (voir fin du paragraphe B-1 précédent). Il importe toutefois de noter qu'un tel résultat n'est valable que si le continuum auquel est couplé l'état discret $|\varphi_i\rangle$ est très plat, plus précisément si la quantité $|V_{fi}|^2 \rho(E_f)$ varie très lentement avec E_f . Si le continuum possède des structures responsables de variations rapides de $|V_{fi}|^2 \rho(E_f)$, des oscillations amorties peuvent subsister dans $|\tilde{U}_{ii}(T)|^2$ (voir complément C III).

(*) Un modèle simple d'état discret couplé à un continuum est également analysé dans le complément C I. Il permet d'obtenir de manière élémentaire la décroissance exponentielle décrite par l'expression (B.10).

3. Couplages à l'intérieur d'un continuum ou entre continuums

Il nous reste à envisager le cas où l'état initial $|\varphi_i\rangle$ et l'état final $|\varphi_f\rangle$ du processus physique étudié appartiennent tous deux à un même continuum ou à deux continuums différents d'états propres de H_0 . Des situations de ce type se rencontrent fréquemment lors de l'étude de la diffusion de photons par des atomes. Dans ce cas, l'état $|\varphi_i\rangle(|\varphi_f\rangle)$ représente l'atome dans un niveau d'énergie donné en présence d'un photon incident (diffusé). Comme l'énergie des photons incident et diffusé peut varier de manière continue, $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ appartiennent bien chacun à un continuum.

Pour T suffisamment grand, l'amplitude de transition $\tilde{U}_{fi}(T)$ n'est autre qu'un élément de la matrice *S de diffusion*. Le calcul quantique de $\tilde{U}_{fi}(T)$ donne (voir compléments A_I et B_{III}) :

$$\tilde{U}_{fi}(T) = \delta_{fi} - 2\pi i \delta^{(T)}(E_f - E_i) \mathcal{T}_{fi} \quad (\text{B.13})$$

où $\delta^{(T)}$ est une fonction delta de largeur \hbar/T , et où \mathcal{T}_{fi} est la matrice de transition dont le développement en puissances de V (développement de Born) est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{fi} = & \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_f | V \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} V | \varphi_i \rangle + \\ & + \langle \varphi_f | V \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} V | \varphi_i \rangle + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

η étant infiniment petit et positif.

Remarque

Il peut arriver que le développement de Born ne converge pas et que l'expression (B.14) n'ait donc pas de sens. C'est ce qui se passe notamment lorsque H_0 a un état propre *discret* $|\varphi_k\rangle$ dont l'énergie E_k coïncide avec celle des états initial $|\varphi_i\rangle$ et final $|\varphi_f\rangle$ (cas de la « diffusion résonnante »). On peut cependant établir une expression compacte de la matrice de transition \mathcal{T}_{fi} (voir complément B_{III} , § 1.b) :

$$\mathcal{T}_{fi} = \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_f | V \frac{1}{E_i - H + i\eta} V | \varphi_i \rangle \quad (\text{B.15})$$

où c'est H et non H_0 qui figure dans le dénominateur du deuxième terme. On peut vérifier que le développement formel de l'expression (B.15) redonne bien le développement (B.14). En effet, l'identité

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B} (B - A) \frac{1}{A} \quad (\text{B.16})$$

appliquée à $A = E_i - H + i\eta$, $B = E_i - H_0 + i\eta$ donne

$$\frac{1}{E_i - H + i\eta} = \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} + \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} V \frac{1}{E_i - H + i\eta} \quad (\text{B.17})$$

L'itération de (B.17), reportée dans le deuxième terme de (B.15), redonne bien (B.14).

Comme dans le paragraphe B.2 précédent, le calcul de la probabilité de transition $|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$ fait apparaître, si $|\varphi_f\rangle \neq |\varphi_i\rangle$, le carré de la fonction $\delta^{(T)}$, proportionnel à $T\delta^{(T)}$. Il est donc possible de définir une probabilité de transition par unité de temps :

$$w_{fi} = \frac{1}{T} |\tilde{U}_{fi}(T)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{T}_{fi}|^2 \delta^{(T)}(E_f - E_i) \quad (\text{B.18})$$

Comme l'état final $|\varphi_f\rangle$ n'est pas normalisable, c'est la somme de w_{fi} sur un groupe d'états finals qui a un sens physique. Cette sommation fait apparaître la densité d'états finals $\rho(E_f = E_i)$. Enfin, l'état initial $|\varphi_i\rangle$ est lui aussi non normalisable puisqu'il appartient à un continuum. On peut cependant associer un flux incident à un tel état $|\varphi_i\rangle$, et il est bien connu que le rapport entre la probabilité de transition par unité de temps de l'état $|\varphi_i\rangle$ vers un groupe d'états finals et le flux incident associé à $|\varphi_i\rangle$ n'est autre qu'une *section efficace de diffusion*. On voit ainsi comment il est possible d'extraire une grandeur physique mesurable, comme une section efficace, des amplitudes de transition $\tilde{U}_{fi}(T)$ entre deux états appartenant à des continuums. Nous donnerons dans la suite de nombreux exemples de processus de diffusion (diffusions Rayleigh, Raman, Compton, photoionisation, Bremsstrahlung...).

Remarque

L'expression (B.18) évoque une « règle d'or de Fermi généralisée », où le couplage \mathcal{T}_{fi} entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ contient tous les ordres en V . Il convient toutefois de noter que l'expression (B.13), et l'expression (B.18) qui en découle, ne sont valables à tous les ordres en V que si $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ appartiennent tous deux à un continuum. De plus, l'expression exacte (B.15) de \mathcal{T}_{fi} doit être utilisée s'il existe des états discrets résonnantes intermédiaires.

Dans le cas où l'un des deux états $|\varphi_i\rangle$ ou $|\varphi_f\rangle$ est discret, la différence entre $\tilde{U}_{fi}(T)$ et δ_{fi} n'est proportionnelle à $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ qu'à l'ordre le plus bas en V .

C – APPLICATION A L'ÉLECTRODYNAMIQUE

1. Hamiltonien en jauge de Coulomb

Nous considérons maintenant le cas de l'électrodynamique. Le système étudié est formé alors par un ensemble de particules chargées α , de charges q_α et de masses m_α , interagissant avec le champ électromagnétique. Soient \mathbf{r}_α et $\mathbf{p}_\alpha = (\hbar/i) \nabla_\alpha$ la position et l'impulsion de la particule α , $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ le potentiel vecteur du champ qui, en jauge de Coulomb, est transverse ($\mathbf{A} = \mathbf{A}_\perp$). L'hamiltonien qui décrit la dynamique de ce système s'écrit, en jauge de Coulomb (voir appendice, § 3)

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]^2 - \sum_{\alpha} \frac{g_\alpha q_\alpha}{2m_\alpha} \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) + V_{Coul} + H_R \quad (C.1)$$

Le premier terme de (C.1) représente l'énergie cinétique des particules, puisque la vitesse $\dot{\mathbf{r}}_\alpha$ de la particule α vaut

$$\dot{\mathbf{r}}_\alpha = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}_\alpha, H] = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_\alpha} = \frac{1}{m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)] \quad (C.2)$$

Le second terme de (C.1) représente l'interaction entre les moments magnétiques de spin des particules (\mathbf{S}_α est le spin de la particule α , g_α son facteur de Landé) avec le champ magnétique \mathbf{B} du rayonnement évalué aux points où se trouvent les particules. Le troisième terme, V_{Coul} , est l'énergie de Coulomb du système de particules, somme des énergies d'interaction coulombienne entre paires de particules (α, β) et des énergies coulombiennes propres $\varepsilon_{Coul}^\alpha$ de chaque particule α

$$V_{Coul} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{q_\alpha q_\beta}{8\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|} + \sum_{\alpha} \varepsilon_{Coul}^\alpha \quad (C.3)$$

$\varepsilon_{Coul}^\alpha$ est une constante donnée par la formule (43) de l'appendice. Enfin, le dernier terme H_R est l'énergie des champs transverses (électrique \mathbf{E}_\perp et magnétique \mathbf{B})

$$H_R = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}_\perp^2(\mathbf{r}) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r})] \quad (C.4.a)$$

qui s'exprime également simplement en fonction des opérateurs d'annihilation et de création a_j et a_j^+ d'un photon du « mode » normal de vibration j du champ (repéré par le vecteur d'onde \mathbf{k}_j , la polarisation ϵ_j et la fréquence $\omega_j = ck_j$)

$$H_R = \sum_j \hbar\omega_j (a_j^+ a_j + \frac{1}{2}) \quad (C.4.b)$$

A chaque mode j est donc associé un oscillateur harmonique à une dimension, l'état propre $|n_j\rangle$ d'un tel oscillateur (avec $n_j = 0, 1, 2, \dots$) représentant un état où le mode j contient n_j photons d'énergie $\hbar\omega_j$, d'impulsion $\hbar\mathbf{k}_j$ et de polarisation ϵ_j . Rappelons enfin que les divers champs transverses \mathbf{E}_\perp , \mathbf{B} ainsi que \mathbf{A} s'expriment sous forme d'une combinaison linéaire des opérateurs a_j et a_j^\dagger (voir expressions (29), (30) et (28) de l'appendice).

Pour la suite, il est utile de réécrire l'hamiltonien H sous la forme

$$H = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + H_R + V_{Coul} + H_{I1} + H_{I2} + H_{I1}^S \quad (\text{C.5.a})$$

avec

$$H_{I1} = - \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{C.5.b})$$

$$H_{I1}^S = - \sum_\alpha g_\alpha \frac{q_\alpha}{2m_\alpha} \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \quad (\text{C.5.c})$$

$$H_{I2} = \sum_\alpha \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]^2 \quad (\text{C.5.d})$$

La décomposition de H en $H_0 + V$ peut s'effectuer de plusieurs façons. Nous envisageons maintenant deux d'entre elles conduisant à différents types de développements perturbatifs pour les amplitudes de transition.

2. Développement vis-à-vis des charges q_α

Une première possibilité consiste à regrouper dans H_0 tous les termes indépendants de q_α :

$$H_0 = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + H_R \quad (\text{C.6.a})$$

Les charges q_α apparaissent ainsi comme les paramètres de couplage caractérisant l'importance de la perturbation :

$$V = V_{Coul} + H_{I1} + H_{I1}^S + H_{I2} \quad (\text{C.6.b})$$

Les états propres de H_0 représentent alors simplement des particules libres (états propres de $\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha$) en présence de photons transverses (états propres de H_R). Aucun état lié de particules ne peut apparaître dans H_0 , car aucun couplage, ni direct, ni indirect, n'existe entre les particules.

Tous les termes contenus dans V sont ensuite traités de manière perturbative, aussi bien l'interaction de Coulomb que l'interaction entre les particules et le champ transverse. Les problèmes physiques qui peuvent être étudiés simplement dans un tel point de vue sont alors essentiellement des problèmes de diffusion entre particules, entre particules et photons (diffusion coulombienne, diffusion Compton, émission de rayonnement de freinage...).

3. Développement vis-à-vis de l'interaction avec le champ transverse

La deuxième décomposition de H que nous envisagerons ici consiste à regrouper dans H_0 tous les termes qui dépendent des seules variables dynamiques des particules, ou des seules variables dynamiques du champ transverse, mais non des deux à la fois :

$$H_0 = H_P + H_R \quad (\text{C.7.a})$$

où

$$H_P = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V_{Coul} \quad (\text{C.7.b})$$

est un hamiltonien de particules. La perturbation V contient alors tous les termes contenant à la fois des opérateurs de particules et des opérateurs de champ transverse :

$$V = H_{I1} + H_{I1}^S + H_{I2} \quad (\text{C.7.c})$$

Le développement perturbatif en puissances de V est donc un développement vis à vis de l'interaction entre les particules et le champ transverse.

Comme l'interaction de Coulomb V_{Coul} est incluse dans l'hamiltonien des particules, un tel hamiltonien peut décrire maintenant des états liés. En fait, les états propres de H_P sont caractérisés par deux types de nombres quantiques, d'une part des nombres quantiques *externes*, décrivant le mouvement du centre de masse de l'ensemble des particules, d'autre part des nombres quantiques *internes*, décrivant l'état d'excitation du système des particules dans le référentiel du centre de masse. Par exemple, si les particules étudiées forment un atome ou une molécule, les nombres quantiques internes repèrent les niveaux d'énergie de cet atome ou de cette molécule. Les états propres de H_0 décrivent donc des situations où des systèmes de particules, comme des atomes, des molécules, des ions... dans des états internes bien définis et avec une impulsion bien définie, sont en présence d'un certain nombre de photons transverses caractérisés par une énergie, une impulsion et une polarisation bien définies.

Le traitement perturbatif de V permet ensuite de décrire des processus d'absorption ou d'émission de photons par de tels systèmes de particules. Nous donnerons plus loin une représentation diagrammatique des amplitudes de transition induites par V permettant de visualiser ces divers processus.

Remarque

Lorsque le système des particules est formé de plusieurs systèmes distincts A, B, \dots (atomes, molécules, ions, électrons...), bien séparés les uns des autres, il peut être intéressant de ne garder dans H_0 que les énergies de Coulomb à l'intérieur de chaque système, $V_{Coul}^{AA}, V_{Coul}^{BB} \dots$, et de reporter dans l'hamiltonien d'interaction V l'énergie d'interaction coulombienne entre systèmes différents, $V_{Coul}^{AB} \dots$. Les états propres de H_0 représentent alors des situations où les divers systèmes $A, B \dots$ sont dans des états externes et internes bien définis, sans interactions mutuelles, et en présence d'un certain nombre de photons.

4. Avantages liés à la prise en compte de l'interaction de Coulomb dans l'hamiltonien des particules

Un premier avantage de la décomposition (C.7), par rapport à la décomposition (C.6), est de permettre de considérer comme non perturbés des états où des systèmes de particules chargées sont liées par l'interaction de Coulomb (atomes, molécules, ions...). De tels états subsistent avant le branchement et après le branchement de V (voir figure 1). Avec l'autre décomposition (C.6), aucun état lié ne pourrait subsister en l'absence de V (*). Les atomes, molécules, ions... se dissocieraient en noyaux et électrons avant le branchement et après le débranchement de V , et il serait beaucoup plus difficile de traiter des processus comme l'émission, l'absorption ou la diffusion de photons par de tels systèmes, processus qui jouent cependant un rôle important dans toute la physique des basses énergies.

Un deuxième avantage de la décomposition (C.7) est que V_{Coul} est, dans le domaine non relativiste, beaucoup plus important que l'interaction avec le champ transverse. Il est donc tout à fait indiqué de partir des états propres de H_0 et de traiter l'effet des interactions avec le champ transverse comme une perturbation.

Remarques

- (i) C'est l'élimination du potentiel scalaire et du potentiel vecteur longitudinal qui fait apparaître l'interaction de Coulomb comme un terme purement particulaire en jauge de Coulomb. Dans une autre jauge,

(*) Nous ignorons ici bien sûr les interactions autres qu'électromagnétiques, par exemple les interactions fortes responsables de la cohésion des noyaux.

comme la jauge de Lorentz, l'interaction coulombienne n'apparaît que dans un traitement au deuxième ordre de l'interaction entre les particules et les photons scalaires et longitudinaux (*). Les avantages de la décomposition (C.7) que nous venons de discuter sont donc étroitement liés au choix de la jauge de Coulomb.

(ii) De tels avantages subsistent dans d'autres formulations de l'électrodynamique quantique équivalentes à l'électrodynamique en jauge de Coulomb, comme par exemple celle conduisant à l'hamiltonien dipolaire électrique (voir appendice, § 5). Le nouvel hamiltonien H' , transformé unitaire de $H = H_0 + V$, peut encore s'écrire sous la forme $H' = H_0 + V'$, où H_0 a la même expression qu'en (C.7) et contient en particulier l'interaction de Coulomb.

5. Représentation diagrammatique des amplitudes de transition

Utilisons par exemple la décomposition (C.7). Le développement de perturbation de l'opérateur d'évolution fait apparaître les amplitudes de transition comme des produits d'éléments de matrice de V entre états propres de H_0 et de facteurs d'évolution libre entre deux interactions, ces produits étant sommés sur tous les temps et sur tous les états intermédiaires (voir complément A_I , § 2.a) :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | U(t_f, t_i) | \varphi_i \rangle &= \delta_{fi} e^{-iE_f(t_f - t_i)/\hbar} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_f \geq \tau_n \cdots \tau_2 \geq \tau_1 \geq t_i} d\tau_n \cdots d\tau_2 d\tau_1 \times \\ &\quad \times \sum_{\varphi_{n-1} \cdots \varphi_1} e^{-iE_f(t_f - \tau_n)/\hbar} \langle \varphi_f | V | \varphi_{n-1} \rangle e^{-iE_{n-1}(\tau_n - \tau_{n-1})/\hbar} \cdots \\ &\quad \cdots \langle \varphi_2 | V | \varphi_1 \rangle e^{-iE_1(\tau_2 - \tau_1)/\hbar} \langle \varphi_1 | V | \varphi_i \rangle e^{-iE_i(\tau_1 - t_i)/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Il sera commode pour la suite d'utiliser une représentation diagrammatique de ces produits, car une telle représentation permet de visualiser les processus physiques intervenant dans l'amplitude de transition.

La propagation libre des particules sera représentée par des lignes droites, celle des photons par des lignes ondulées. Auprès de chaque ligne figurent les nombres quantiques repérant l'état libre correspondant (a, b, \dots pour l'état des particules, vecteur d'onde \mathbf{k} et polarisation ϵ pour les photons). À ces lignes sont associés des facteurs exponentiels du type $\exp[-iE(\tau_k - \tau_l)/\hbar]$, décrivant l'évolution libre de l'état d'énergie E entre les instants τ_k et τ_l associés aux extrémités de la ligne (ces instants ne figurent pas explicitement sur le diagramme pour alléger l'écriture). Chaque diagramme se lit de bas en haut (pour suivre

(*) Voir par exemple le complément B_V de « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique ».

le déroulement temporel du processus). Les lignes de particules et de photons arrivant du bas correspondent à l'état libre dans le ket $|\varphi_i\rangle$ de l'élément de matrice, les lignes de particules et de photons partant vers le haut correspondent à l'état libre dans le bra $\langle\varphi_f|$. Les éléments de matrice de V sont représentés par les points de jonction de ces lignes (vertex), l'élément de matrice étant pris entre l'état décrit par les lignes qui arrivent au vertex et celui décrit par celles qui en partent. Une ligne de photon arrivant et disparaissant en ce point (figure 2.a) correspond à la destruction d'un photon (terme en a de H_{I1} et H_{I1}^S). Une ligne de photon partant de ce point (figure 2.b) correspond à la création d'un photon (terme en a^+ de H_{I1} et H_{I1}^S). Les termes à deux photons de H_{I2} correspondent aux trois figures 2.c (terme en a^2 détruisant deux photons), 2.d (termes en a^{+2} créant deux photons), 2.e (termes en aa^+ ou a^+a créant un photon et en détruisant un autre).

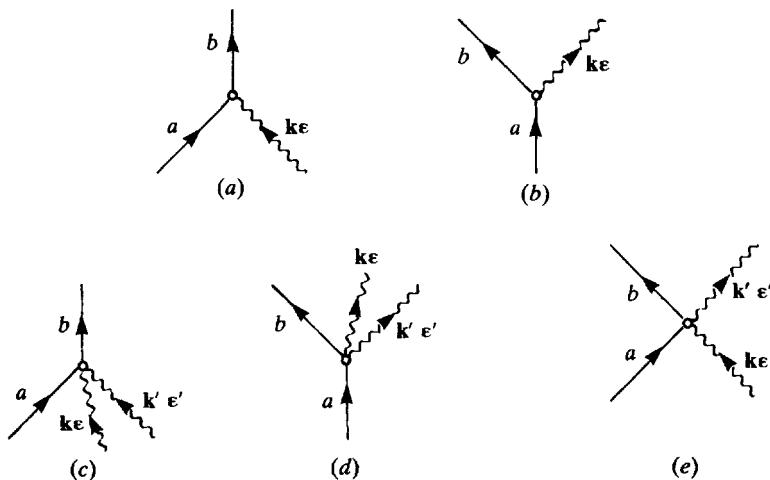


Figure 2. Différents types de vertex correspondant aux divers éléments de matrice de V .

Dans de nombreux processus, il y a plus d'une interaction entre atomes et champs. Le diagramme correspondant contient alors plusieurs vertex et plusieurs lignes associées à la propagation libre entre les interactions. Il symbolise le produit de toutes les quantités (éléments de matrice de V , évolution libre) ainsi représentées. Par exemple, le diagramme de la figure 3 symbolise la quantité

$$\begin{aligned} & \exp[-i(E_c + \hbar\omega')(t_f - \tau_2)/\hbar] \langle c; \mathbf{k}' \epsilon' | V | b; 0 \rangle \times \\ & \times \exp[-iE_b(\tau_2 - \tau_1)/\hbar] \langle b; 0 | V | a; \mathbf{k} \epsilon \rangle \times \\ & \times \exp[-i(E_a + \hbar\omega)(\tau_1 - t_i)/\hbar] \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

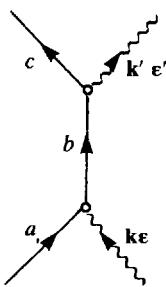


Figure 3. Représentation diagrammatique de l'amplitude de transition (C.9).

et représente l'amplitude de probabilité pour que le système des particules , initialement dans l'état a , absorbe à l'instant τ_1 un photon incident $\mathbf{k}\epsilon$ et passe dans l'état b , puis aboutisse à l'instant τ_2 dans l'état c en émettant un photon $\mathbf{k}'\epsilon'$. D'autres types de diagrammes seront introduits dans la suite de cet ouvrage

Remarque

Dans les autres formulations de l'électrodynamique quantique équivalentes à l'électrodynamique en jauge de Coulomb, l'hamiltonien d'interaction V' peut avoir des éléments de matrice plus simples que V . Par exemple, dans le point de vue dipolaire électrique (voir appendice, § 5), l'hamiltonien d'interaction (en $-q\mathbf{E}_\perp \cdot \mathbf{r}$) ne contient que des termes à un photon en a ou en a^+ . Il n'y a plus de termes à deux photons comme les termes en \mathbf{A}^2 conduisant à des éléments de matrice du type de ceux représentés sur les figures 2.c, 2.d, 2.e. Il en résulte une grande simplification dans les termes d'ordre supérieur du développement perturbatif de l'amplitude de transition.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

A propos de l'importance des amplitudes de probabilité, voir Feynman, Tome III, chapitres 3 et 7 ; Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, chapitre III, partie E ; Lévy-Leblond et Balibar, chapitres 4 et 5.

Le calcul perturbatif des amplitudes de transition se trouve dans de nombreux ouvrages de mécanique quantique. Par exemple : Messiah, chapitre XVII ; Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, chapitre XIII ; Merzbacher, chapitre XVIII ; Schiff, chapitres 8 et 9 ; Feynman and Hibbs, chapitre VI. Des références relatives aux amplitudes de transition entre deux continuums (problèmes de collisions) seront données dans le chapitre III.

Pour l'électrodynamique en jauge de Coulomb, voir l'appendice et les références qui y sont citées.

COMPLÉMENT A_I

**CALCUL PERTURBATIF
DES AMPLITUDES DE TRANSITION -
QUELQUES FORMULES UTILES**

Dans le chapitre I, nous avons utilisé, sans les démontrer, un certain nombre de résultats relatifs aux amplitudes de transition. Le but de ce complément est d'établir de manière succincte ces résultats et de regrouper un certain nombre de formules utiles auxquelles nous nous référerons tout au long de cet ouvrage.

Nous commençons (§ 1) par introduire le point de vue d'interaction et par souligner son intérêt. Nous passons ensuite (§ 2) au calcul perturbatif des amplitudes de transition et nous établissons l'expression des termes d'ordre le plus bas (ordre 0, 1, 2) dans le développement de ces amplitudes en puissances du couplage V . Nous étudions enfin (§ 3) la probabilité de transition de l'état initial vers l'état final en distinguant plusieurs cas suivant la nature discrète ou continue de ces états.

1. Point de vue d'interaction

Comme dans le chapitre I, l'hamiltonien H du système étudié est décomposé sous la forme

$$H = H_0 + V \quad (1)$$

L'hamiltonien non perturbé H_0 est supposé indépendant du temps. Par contre, le couplage V peut en dépendre éventuellement (par exemple, si V est multiplié par le paramètre $\lambda(t)$ dont les variations temporelles sont représentées sur la figure 1 du chapitre).

Le passage du point de vue habituel de Schrödinger au *point de vue d'interaction* par rapport à H_0 est réalisé en appliquant aux vecteurs $|\psi(t)\rangle$ et aux opérateurs A du point de vue de Schrödinger la transformation unitaire

$$T(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} \quad (2)$$

où t_0 est un instant de référence que nous prendrons pour origine des temps ($t_0 = 0$). Si $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ et $\tilde{A}(t)$ représentent les vecteurs et opérateurs dans le nouveau point de vue, nous avons donc

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{iH_0 t / \hbar} |\psi(t)\rangle \quad (3.a)$$

$$\tilde{A}(t) = e^{iH_0 t / \hbar} A e^{-iH_0 t / \hbar} \quad (3.b)$$

Si V était nul, le point de vue d'interaction coïnciderait avec le point de vue de Heisenberg, et $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ resterait fixe au cours du temps. Il s'ensuit que, dans le cas général où V n'est pas nul, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ n'évolue que par suite de la présence du couplage V . Pour le voir de manière plus précise, établissons l'équation d'évolution de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ en appliquant $i\hbar d/dt$ à (3.a) et en utilisant l'équation de Schrödinger pour $i\hbar d|\psi(t)\rangle/dt$. Il vient

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= -H_0 |\tilde{\psi}(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} (H_0 + V) |\psi(t)\rangle \\ &= \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

où

$$\tilde{V}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (5)$$

L'équation (4) montre bien que la vitesse de variation de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ est au moins d'ordre 1 en V . En particulier, dans l'étude d'un processus de collision, où le couplage V peut être débranché dans le passé lointain et dans le futur lointain (voir figure 1 du chapitre I), le vecteur d'état n'évolue pas dans le point de vue d'interaction avant le début et après la fin de la collision. C'est ce qui permet de comprendre pourquoi les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t_f, t_i)$ dans le point de vue d'interaction ont une limite bien définie quand t_f et t_i tendent respectivement vers $+\infty$ et $-\infty$ (matrice de diffusion). Il sera d'ailleurs utile pour la suite d'établir la relation existant entre $\tilde{U}(t_f, t_i)$ et l'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$ du point de vue de Schrödinger. L'équation

$$|\psi(t_f)\rangle = U(t_f, t_i) |\psi(t_i)\rangle \quad (6)$$

donne, compte tenu de (3.a)

$$|\tilde{\psi}(t_f)\rangle = \tilde{U}(t_f, t_i) |\tilde{\psi}(t_i)\rangle \quad (7)$$

avec

$$\tilde{U}(t_f, t_i) = e^{iH_0 t_f/\hbar} U(t_f, t_i) e^{-iH_0 t_i/\hbar} \quad (8)$$

2. Développement perturbatif des amplitudes de transition

a) DÉVELOPPEMENT PERTURBATIF DE L'OPÉRATEUR D'ÉVOLUTION

L'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$ du point de vue de Schrödinger est défini par (6), et vérifie la condition initiale

$$U(t_i, t_i) = \mathbb{1} \quad (9)$$

Compte tenu de l'équation de Schrödinger satisfait par $|\psi(t_f)\rangle$, l'équation (6) est équivalente à l'équation intégrale

$$U(t_f, t_i) = U_0(t_f, t_i) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' U_0(t_f, t') V U(t', t_i) \quad (10)$$

où

$$U_0(t_f, t_i) = e^{-iH_0(t_f - t_i)/\hbar} \quad (11)$$

est l'opérateur d'évolution non perturbé associé à H_0 . Pour démontrer cette équivalence, il suffit de vérifier que l'opérateur U défini par (10) satisfait bien à (9) et à l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d}{dt_f} U(t_f, t_i) = (H_0 + V) U(t_f, t_i) \quad (12)$$

Par itérations successives, l'équation (10) conduit alors au développement perturbatif bien connu de l'opérateur d'évolution

$$U(t_f, t_i) = U_0(t_f, t_i) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t_f, t_i) \quad (13.a)$$

avec

$$\begin{aligned} U^{(n)}(t_f, t_i) &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_f \geq \tau_n \geq \dots \geq \tau_2 \geq \tau_1 \geq t_i} d\tau_n \dots d\tau_2 d\tau_1 \times \\ &\quad \times e^{-iH_0(t_f - \tau_n)/\hbar} V \dots V e^{-iH_0(\tau_2 - \tau_1)/\hbar} V e^{-iH_0(\tau_1 - t_i)/\hbar} \end{aligned} \quad (13.b)$$

La structure du terme (13.b) est celle d'un produit de $(n+1)$ opérateurs d'évolution non perturbés séparés par n interactions V . En prenant les éléments de matrice de (13.b) entre les états propres $\langle \varphi_f |$ et $| \varphi_i \rangle$ de H_0 et en insérant $(n-1)$ fois la relation de fermeture sur les états propres de H_0 entre deux opérateurs V successifs, on retrouve la formule (C.8) du chapitre.

L'équation (8) permet enfin d'obtenir le développement perturbatif de l'opérateur d'évolution dans le point de vue d'interaction

$$\tilde{U}(t_f, t_i) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{U}^{(n)}(t_f, t_i) \quad (14.a)$$

$$\tilde{U}^{(n)}(t_f, t_i) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_f \geq \tau_n \geq \dots \geq \tau_2 \geq \tau_1 \geq t_i} d\tau_n \dots d\tau_2 d\tau_1 \tilde{V}(\tau_n) \dots \tilde{V}(\tau_2) \tilde{V}(\tau_1) \quad (14.b)$$

La comparaison de (14.b) et (13.b) montre bien que le passage dans le point de vue d'interaction élimine les exponentielles d'évolution libre $\exp(-iH_0 t_f/\hbar)$ et $\exp(iH_0 t_i/\hbar)$ relatives aux instants initial et final.

Soit \mathcal{S}_{fi} l'élément de matrice de $\tilde{U}(t_f, t_i)$ entre les états propres $\langle \varphi_f |$ et $| \varphi_i \rangle$ de H_0

$$\mathcal{S}_{fi} = \langle \varphi_f | \tilde{U}(t_f, t_i) | \varphi_i \rangle \quad (15)$$

Le développement perturbatif (14) donne alors

$$\mathcal{S}_{fi} = \delta_{fi} + \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{S}_{fi}^{(n)} \quad (16.a)$$

$$\mathcal{S}_{fi}^{(n)} = \langle \varphi_f | \tilde{U}^{(n)}(t_f, t_i) | \varphi_i \rangle \quad (16.b)$$

Nous allons maintenant calculer les termes d'ordre 1 et 2 en V du développement perturbatif de l'amplitude de transition \mathcal{S}_{fi} .

b) AMPLITUDE DE TRANSITION D'ORDRE 1 EN V

Compte tenu de (16.b), (14.b) et (5)

$$\mathcal{S}_{fi}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_f} d\tau_1 V_{fi} e^{i(E_f - E_i)\tau_1/\hbar} \quad (17)$$

où nous avons posé $V_{fi} = \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle$. Nous supposerons ici V constant et choisirons l'origine des temps de telle sorte que

$$t_i = -T/2 \quad t_f = +T/2 \quad (18)$$

où T est la durée de l'interaction. L'intégrale sur τ_1 de (17) se calcule alors exactement et il vient

$$\mathcal{S}_{fi}^{(1)} = -2\pi i V_{fi} \delta^{(T)}(E_f - E_i) \quad (19)$$

où

$$\delta^{(T)}(E_f - E_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} \frac{d\tau_1}{\hbar} e^{i(E_f - E_i)\tau_1/\hbar} = \frac{1}{\pi} \frac{\sin((E_f - E_i)T/2\hbar)}{(E_f - E_i)} \quad (20)$$

D'après la première égalité (20), $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ tend vers $\delta(E_f - E_i)$ quand $T \rightarrow \infty$. En fait, d'après la deuxième égalité (20), $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ est une fonction de diffraction représentée sur la figure 1, d'amplitude maximale $T/2\pi\hbar$ pour $E_f - E_i = 0$, de largeur de l'ordre de $4\pi\hbar/T$ (distance entre les deux premiers zéros de part et d'autre du maximum) et d'intégrale égale à 1. C'est donc une fonction delta approchée exprimant la conservation de l'énergie à l'incertitude \hbar/T près, liée à la durée finie de l'interaction.

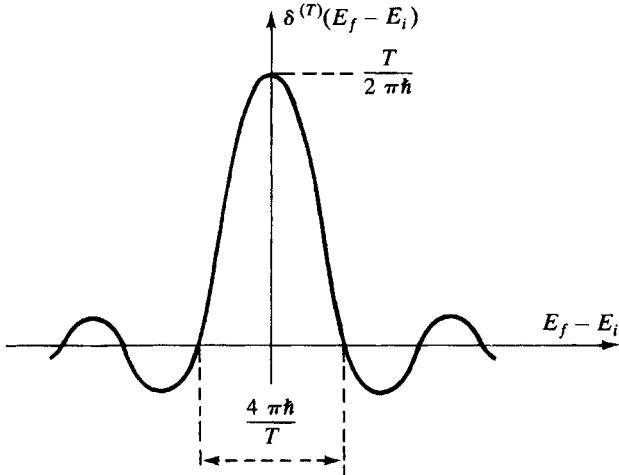


Figure 1. Variations avec $E_f - E_i$ de la fonction $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$.

Remarque

Si V est multiplié par la fonction $\lambda(t)$ de la figure 1 du chapitre I, la formule (19) reste valable mais $\delta^{(T)}$ est alors la transformée de Fourier d'un créneau de largeur de l'ordre de T , dont les bords sont non plus « carrés » mais « arrondis ». La fonction $\delta^{(T)}$ est dans ce cas une fonction de diffraction "apodisée" dont l'intégrale est toujours égale à 1 et qui peut donc être encore considérée comme une fonction delta de largeur \hbar/T .

c) AMPLITUDE DE TRANSITION D'ORDRE 2 EN V

A l'ordre 2, les équations (16.b), (14.b) et (5) donnent

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{fi}^{(2)} = & \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{+T/2 \geq \tau_2 \geq \tau_1 \geq -T/2} d\tau_1 d\tau_2 \times \\ & \times \sum_k V_{fk} V_{ki} e^{i(E_f - E_k)\tau_2/\hbar} e^{i(E_k - E_i)\tau_1/\hbar} \end{aligned} \quad (21)$$

La somme sur les états intermédiaires k représente une somme sur les états propres $|\varphi_k\rangle$ de H_0 . Pour se débarrasser de la restriction $\tau_2 \geq \tau_1$, il suffit de multiplier l'intégrand de (21) par la fonction de Heaviside $\theta(\tau_2 - \tau_1)$ égale à 1 pour $\tau_2 > \tau_1$ et 0 pour $\tau_2 < \tau_1$. Utilisons alors l'identité

$$e^{-iE_k(\tau_2 - \tau_1)/\hbar} \theta(\tau_2 - \tau_1) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-iE(\tau_2 - \tau_1)/\hbar}}{E + i\eta - E_k} dE \quad (22)$$

que l'on peut vérifier aisément en calculant l'intégrale de (22) par la méthode des résidus. L'équation (21) peut être alors réécrite

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{fi}^{(2)} = & \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \left(\frac{-1}{2\pi i} \right) \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} d\tau_2 \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} d\tau_1 \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{i(E_f - E)\tau_2/\hbar} e^{-i(E_i - E)\tau_1/\hbar} W_{fi}(E) \end{aligned} \quad (23)$$

où

$$W_{fi}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E + i\eta - E_k} \quad (24)$$

D'après le paragraphe 2-b précédent, les intégrales sur τ_2 et τ_1 donnent respectivement $2\pi\hbar\delta^{(T)}(E_f - E)$ et $2\pi\hbar\delta^{(T)}(E_i - E)$. Ces deux fonctions sont pratiquement nulles dès que E s'écarte de E_f pour la première, de E_i pour la deuxième de plus de \hbar/T . Leur produit est donc une fonction de E qui n'est non nulle que si d'une part E_f et E_i coïncident à \hbar/T près, et si d'autre part E coïncide avec cette valeur commune de E_i et E_f à \hbar/T près.

Pour effectuer la dernière intégrale sur E qui reste à faire dans (23), il faut maintenant comparer la largeur en E de $\delta^{(T)}(E_f - E)$ $\delta^{(T)}(E_i - E)$ qui est de l'ordre de \hbar/T autour de $E_i \approx E_f$, et celle de l'autre fonction de E qui figure dans (23), à savoir $W_{fi}(E)$. Dans de nombreux cas, que nous préciserons plus loin, $W_{fi}(E)$ est une fonction de E qui varie très peu avec E sur un intervalle de largeur \hbar/T . Il est possible alors de remplacer dans (23) $W_{fi}(E)$ par $W_{fi}(E_i)$ et de sortir $W_{fi}(E_i)$ de l'intégrale, ce qui donne

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{fi}^{(2)} = & -\frac{1}{2\pi i} \frac{4\pi^2\hbar^2}{(i\hbar)^2} \left[\lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k + i\eta} \right] \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta^{(T)}(E - E_i) \delta^{(T)}(E - E_f) \end{aligned} \quad (25)$$

L'intégrale sur E de (25) se calcule aisément à partir de la forme intégrale (20) de $\delta^{(T)}$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta^{(T)}(E - E_i) \delta^{(T)}(E - E_f) = \\ & = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau' e^{i(E - E_f)\tau/\hbar} e^{i(E - E_i)\tau'/\hbar} \end{aligned} \quad (26)$$

(Notons qu'il n'y a pas de restriction sur l'ordre temporel de

τ et τ'). L'intégrale sur E de (26) donne $2\pi\hbar \delta(\tau + \tau')$, de sorte que (26) se réduit à

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta^{(T)}(E - E_i) \delta^{(T)}(E - E_f) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} d\tau e^{i(E_i - E_f)\tau/\hbar} = \delta^{(T)}(E_i - E_f) \quad (27)$$

Finalement, en reportant (27) dans (25), nous obtenons

$$\mathcal{S}_{fi}^{(2)} = -2\pi i \left[\lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k + i\eta} \right] \delta^{(T)}(E_i - E_f) \quad (28)$$

Précisons maintenant les cas où $W_{fi}(E)$ peut être considéré comme une fonction de E variant lentement à l'échelle de \hbar/T . Essentiellement, il ne faut pas qu'il y ait des états propres discrets $|\varphi_k\rangle$ de H_0 dont l'énergie E_k soit très voisine de E_i et E_f . En effet, la fonction $(E - E_k + i\eta)^{-1}$ varierait dans ce cas très rapidement avec E au voisinage de $E = E_i$ puisqu'elle diverge pour $E = E_k$. Notons par contre que H_0 peut avoir un spectre continu E_k au voisinage de $E_i \approx E_f$. En effet, la somme sur k dans (24) devient alors une intégrale sur E_k . La fraction $1/(E + i\eta - E_k)$ s'exprime en fonction de $\delta(E - E_k)$ et $\mathcal{P}(1/(E - E_k))$ et donne, lors de l'intégration sur E_k , des fonctions de E qui n'ont aucune raison de diverger au voisinage de $E_i \approx E_f$. Pour T suffisamment grand, ces fonctions peuvent donc être considérées comme variant lentement à l'échelle de \hbar/T .

Finalement, en récapitulant les résultats obtenus dans ce paragraphe, nous pouvons écrire

$$\mathcal{S}_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta^{(T)}(E_f - E_i) \left[V_{fi} + \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k + i\eta} \right] + O(V^3) \quad (29)$$

Remarques

- (i) Si les états initial $|\varphi_i\rangle$, ou final $|\varphi_f\rangle$, ou les deux sont discrets, l'état intermédiaire $|\varphi_k\rangle$ peut coïncider avec cet état discret dans la somme (24), ce qui conduit à une divergence de $W_{fi}(E)$ au voisinage de E_i ou E_f . Ceci ne peut cependant se produire que si l'élément diagonal de V dans l'état discret, V_{ii} (ou V_{ff}), est non nul. On peut toujours réintégrer dans H_0 ces éléments diagonaux (ce qui revient à remplacer E_i par $E_i + V_{ii}$). Il est possible alors d'utiliser l'expression (28) de $\mathcal{S}_{fi}^{(2)}$. Cependant, aux ordres supérieurs à 2, il est impossible en général d'empêcher $|\varphi_i\rangle$ (ou $|\varphi_f\rangle$) d'apparaître comme état intermédiaire.

(ii) Dans le chapitre III, nous introduisons des méthodes de calcul des amplitudes de transition plus puissantes que celle exposée dans ce complément. Ces méthodes permettent de resommer tous les termes de la série des perturbations où apparaissent comme états intermédiaires un ou plusieurs états discrets susceptibles de conduire à des divergences de l'amplitude de transition, parce que leur énergie est très proche de celle des états initial et final. Nous obtiendrons ainsi pour les amplitudes de transition des expressions non perturbatives valables dans des conditions où l'expression (29) ne l'est pas. La même approche permet de généraliser aux ordres supérieurs l'expression (29) de \mathcal{S}_{fi} dans le cas d'un problème de diffusion où $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ appartiennent tous deux au spectre continu de H_0 . On obtient ainsi

$$\mathcal{S}_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \mathcal{T}_{fi} \quad (30)$$

où la matrice de transition \mathcal{T}_{fi} est donnée par l'expression (B.15) du chapitre I. Quand il est valable, le développement en puissances de V de \mathcal{T}_{fi} est le développement de Born dont les deux premiers termes figurent dans le crochet de (29).

3. Probabilité de transition

a) CALCUL DE LA PROBABILITÉ DE TRANSITION VERS UN ÉTAT FINAL DIFFÉRENT DE L'ÉTAT INITIAL

Supposons $|\varphi_f\rangle$ différent de $|\varphi_i\rangle$. Le premier terme, δ_{fi} , de (29) est alors nul. La probabilité de transition $\mathcal{P}_{fi}(T)$ de $|\varphi_i\rangle$ vers $|\varphi_f\rangle$ au bout d'un temps T vaut dans ce cas

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{fi}(T) &= |\mathcal{S}_{fi}|^2 = 4\pi^2 [\delta^{(T)}(E_i - E_f)]^2 \times \\ &\times \left| V_{fi} + \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k + i\eta} \right|^2 + \dots \end{aligned} \quad (31)$$

D'après (20), la fonction

$$[\delta^{(T)}(E_f - E_i)]^2 = \frac{1}{\pi^2} \frac{\sin^2(E_f - E_i)T/2\hbar}{(E_f - E_i)^2} \quad (32)$$

est le carré d'une fonction de diffraction. Pour $E_f = E_i$, $[\delta^{(T)}(E_f - E_i)]^2$ atteint sa valeur maximale qui vaut $T^2/4\pi^2\hbar^2$. La distance entre les deux premiers zéros de cette fonction de part et d'autre de son maximum est, comme pour $\delta^{(T)}$, égale à $4\pi\hbar/T$ et donne une idée de sa largeur. Pour la suite, nous aurons besoin de l'intégrale sur E_f de cette fonction qui est de l'ordre de $(T^2/4\pi^2\hbar^2) \times (4\pi\hbar/T)$, c'est-à-dire de l'ordre de $T/\pi\hbar$. Effectivement, à partir de (27), on obtient

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE_f [\delta^{(T)}(E_f - E_i)]^2 = \frac{T}{2\pi\hbar} \quad (33)$$

b) PROBABILITÉ DE TRANSITION ENTRE DEUX ÉTATS DISCRETS. CALCUL À L'ORDRE LE PLUS BAS EN V

Commençons par supposer que $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ sont deux états propres discrets de H_0 , d'énergies E_i et E_f proches l'une de l'autre et éloignées de toutes les autres valeurs propres de H_0 . A l'ordre le plus bas en V , la probabilité de transition de $|\varphi_i\rangle$ vers $|\varphi_f\rangle$ s'écrit, compte tenu de (31) et (32)

$$\mathcal{P}_{fi}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2(E_f - E_i)T/2\hbar \quad (34)$$

Cette formule n'est bien sûr valable que si T est suffisamment petit pour que le traitement perturbatif de V soit justifié. Il est intéressant de la comparer avec la formule exacte obtenue dans le cas simple où $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ sont les seuls états propres de H_0 , et où par suite la diagonalisation exacte de $H_0 + V$ est possible (*):

$$\mathcal{P}_{fi}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2 + 4|V_{fi}|^2} \sin^2\left[\frac{T}{2\hbar} \sqrt{(E_f - E_i)^2 + 4|V_{fi}|^2}\right] \quad (35)$$

Les expressions (34) et (35) coïncident bien à l'ordre le plus bas en V_{fi} . En particulier, pour $E_f = E_i$, l'équation (34) donne

$$\mathcal{P}_{fi}(T) = |V_{fi}|^2 T^2 / \hbar^2 \quad (36)$$

qui est le début du développement de la fonction $\sin^2[|V_{fi}|T/\hbar]$ décrivant la nutation de Rabi résonnante entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$.

c) CAS OÙ L'ÉTAT FINAL APPARTIENT À UN CONTINUUM D'ÉNERGIE. DENSITÉ D'ÉTATS

Quand l'état final appartient à un continuum d'énergie, $\mathcal{P}_{fi}(T)$ n'est plus une probabilité de transition, mais une *densité de probabilité* de transition. La quantité qui a un sens physique est alors la probabilité pour que le système atteigne un groupe d'états finals caractérisé par des valeurs propres tombant dans un certain domaine D_f . Pour fixer les idées, nous allons tout d'abord considérer deux exemples concrets qui nous permettront d'introduire la notion de densité d'états.

α) Exemple des particules matérielles libres

Supposons que les états finals $|\varphi_f\rangle$ soient les états $|\mathbf{p}\rangle$ d'impulsion \mathbf{p} bien définie d'une particule libre de masse M , satisfaisant la relation

(*) Voir par exemple Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, chapitre IV, § C-3. Nous supposons de plus ici $V_{ii} = V_{ff} = 0$.

d'orthonormalisation habituelle

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (37)$$

Un état final tel que $|\mathbf{p}_f\rangle$ n'a pas de sens physique (sa norme est infinie). Par contre, on peut considérer la probabilité pour que, dans l'état final, l'impulsion de la particule pointe dans l'angle solide $\delta\Omega_f$ autour de la direction de \mathbf{p}_f et ait une énergie comprise dans l'intervalle δE_f autour de $E_f = p_f^2/2M$, ce qui définit un domaine D_f dans l'espace des impulsions. Cette probabilité vaut

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, T) = \int_{\mathbf{p} \in D_f} d^3p |\langle \mathbf{p} | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle|^2 \quad (38)$$

Au lieu d'utiliser p_x, p_y, p_z pour caractériser l'état final $|\mathbf{p}\rangle$, il est possible de prendre d'autres variables comme l'énergie E et les angles polaires θ et φ caractérisant la direction de \mathbf{p} , $d\Omega$ étant l'angle solide correspondant à $d\theta$ et $d\varphi$, il vient

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = \rho(E) dE d\Omega \quad (39)$$

où $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ et où

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = p^2 \frac{M}{E} = M \sqrt{2ME} \quad (40)$$

est par définition la densité d'états finals. L'expression (38) s'écrit alors

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, T) = \int_{\substack{\Omega \in \delta\Omega_f \\ E \in \delta E_f}} d\Omega dE \rho(E) |\langle \mathbf{p} | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle|^2 \quad (41)$$

Remarque

Il est possible de discréteriser le continuum et d'obtenir des états finals de norme 1 en enfermant les particules dans un cube de côté L et en imposant des conditions aux limites périodiques pour obtenir des états finals ayant la même dépendance spatiale que les états $|\mathbf{p}\rangle$. La somme sur les états finals compris dans un domaine D_f est alors une vraie somme discrète. Quand L tend vers l'infini, il est commode de remplacer cette somme discrète par une intégrale. La densité d'états $\rho(E)$ est alors définie de manière que $\rho(E) dE d\Omega$ soit le nombre d'états discréétisés contenus dans le domaine associé à dE et $d\Omega$. A cause des conditions aux limites périodiques, les valeurs possibles du vecteur d'onde \mathbf{k} (qui est égal à \mathbf{p}/\hbar) forment dans l'espace des \mathbf{k} un réseau régulier de points avec un point par volume élémentaire $(2\pi/L)^3$. Les nombre d'états dans d^3k est donc $(L/2\pi)^3 k^2 dk d\Omega$, ce qui donne pour $\rho(E)$ la valeur

$$\rho(E) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^3} M \sqrt{2ME} \quad (42)$$

Le résultat final pour la probabilité de transition (41) ne dépend bien sûr pas de L . Pour le voir, il suffit de noter que la présence de $\langle \mathbf{p} |$ dans l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution entraîne que le carré du module de cet élément de matrice contient un facteur $1/L^3$ qui se compense avec le facteur L^3 apparaissant dans la densité d'états (42).

β) Cas des photons

Un autre exemple important de continuum d'énergie est celui des états à un photon $|\mathbf{k}\epsilon\rangle$ satisfaisant la relation d'orthonormalisation

$$\langle \mathbf{k}'\epsilon' | \mathbf{k}\epsilon \rangle = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (43)$$

Rappelons que les états $|\mathbf{k}\epsilon\rangle$ sont obtenus par action sur le vide des opérateurs de création $a_\epsilon^+(\mathbf{k})$. Il est possible alors d'écrire une équation analogue à (38) où il faut de plus sommer sur les polarisations et remplacer d^3p par

$$d^3k = k^2 dk d\Omega = \rho(E) dE d\Omega \quad (44)$$

avec

$$\rho(E) = k^2 \frac{dk}{dE} = \frac{E^2}{\hbar c^2 \hbar c} \frac{1}{\hbar^3 c^3} = \frac{E^2}{\hbar^3 c^3} \quad (45)$$

Pour établir (45), nous avons utilisé la relation $E = \hbar\omega = \hbar ck$ entre énergie E et module du vecteur d'onde \mathbf{k} pour un photon (au lieu de $E = p^2/2M$).

Dans le cas où le rayonnement est enfermé dans un cube de dimension L , il faut remplacer (45) par

$$\rho(E) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{E^2}{\hbar^3 c^3} \quad (46)$$

γ) Cas général

Dans le cas général, nous supposerons que l'état final $|\varphi_f\rangle$, appartenant à un continuum d'énergie, est caractérisé par son énergie E et un ensemble d'autres grandeurs physiques désignées par β , et nous noterons

$$\delta\mathcal{P}(E_f, \beta_f, T) = \int_{\substack{E \in \delta E_f \\ \beta \in \delta \beta_f}} dE d\beta \rho(E, \beta) |\langle E, \beta | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle|^2 \quad (47)$$

la probabilité pour que, partant de l'état $|\varphi_i\rangle$ (normé), le système aboutisse après un temps T dans l'un des états finals du domaine D_f caractérisé par δE_f et $\delta \beta_f$. Dans (47), $\rho(E, \beta)$ est la densité d'états finals qui, dans le cas général, dépend à la fois de E et de β .

d) PROBABILITÉ DE TRANSITION PAR UNITÉ DE TEMPS VERS UN GROUPE D'ÉTATS FINALS APPARTENANT À UN CONTINUUM D'ÉNERGIE

Dans l'expression (47), $|\langle E, \beta | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle|^2$ n'est autre que le carré du module de l'amplitude de transition \mathcal{S}_{fi} donnée en (29) avec $\delta_{fi} = 0$. A l'ordre le plus bas en V , nous obtenons en notant $v(E, \beta; \varphi_i)$ l'élément de matrice V_{fi}

$$\delta \mathcal{P}(E_f, \beta_f, T) = \int_{\substack{E \in \delta E_f \\ \beta \in \delta \beta_f}} dE d\beta \rho(E, \beta) 4\pi^2 |v(E, \beta; \varphi_i)|^2 [\delta^{(T)}(E - E_i)]^2 \quad (48)$$

En général, $\rho(E, \beta) |v(E, \beta; \varphi_i)|^2$ est une fonction de E variant avec E beaucoup plus lentement que $[\delta^{(T)}(E - E_i)]^2$ qui, pour T suffisamment grand, a une largeur très faible, de l'ordre de \hbar/T . Si tel est le cas, on peut alors remplacer $[\delta^{(T)}(E - E_i)]^2$ par une « fonction delta » centrée en E_i . Comme l'intégrale sur E de $[\delta^{(T)}(E - E_i)]^2$ est, d'après (33), égale à $T/2\pi\hbar$, il est justifié d'écrire (vis à vis des fonctions lentement variables de E)

$$[\delta^{(T)}(E - E_i)]^2 = \frac{T}{2\pi\hbar} \delta^{(T)}(E - E_i) \quad (49)$$

Le report de (49) dans (48) montre alors que $\delta \mathcal{P}$ est proportionnel à la durée T de l'interaction, ce qui permet de définir une probabilité de transition *par unité de temps* $\delta w(E_f, \beta_f)$

$$\begin{aligned} \delta w(E_f, \beta_f) &= \frac{1}{T} \delta \mathcal{P}(E_f, \beta_f, T) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int_{\substack{E \in \delta E_f \\ \beta \in \delta \beta_f}} dE d\beta \rho(E, \beta) |v(E, \beta; \varphi_i)|^2 \delta^{(T)}(E - E_i) \end{aligned} \quad (50)$$

Supposons que l'intervalle δE_f contienne E_i et que δE_f soit supérieur à la largeur \hbar/T de $\delta^{(T)}(E - E_i)$. L'intégrale sur E est alors immédiate. Si de plus $\delta \beta_f$ est suffisamment petit pour que l'intégrale sur β ne soit pas nécessaire, il vient finalement

$$\frac{\delta w(E_f, \beta_f)}{\delta \beta_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |v(E_f = E_i, \beta_f; \varphi_i)|^2 \rho(E_f = E_i, \beta_f) \quad (51)$$

qui n'est autre que la règle d'or de Fermi pour la probabilité de transition par unité de temps et par unité d'intervalle $\delta \beta$.

Remarque : Somme sur les polarisations

Revenons à l'exemple des photons. Il est très fréquent que l'élément de matrice au carré de (50) soit de la forme $|\epsilon \cdot X|^2$ où X est une grandeur vectorielle et où ϵ est le vecteur polarisation du photon. Si l'on n'observe pas la polarisation du photon émis, il faut, pour une direction d'émission k donnée, sommer sur les deux états de polarisation ϵ et ϵ' orthogonaux à k et orthogonaux entre eux, c'est-à-dire calculer

$$\sum_{\epsilon \perp k} |\epsilon \cdot X|^2 = \sum_{i,j=x,y,z} \left(\sum_{\epsilon \perp k} \epsilon_i \epsilon_j \right) X_i X_j^* \quad (52)$$

Pour évaluer la somme entre parenthèses de (52), il suffit de noter que ϵ, ϵ' et $\kappa = k/k$ forment une base orthonormée pour laquelle la relation de fermeture s'écrit

$$\epsilon_i \epsilon_j + \epsilon'_i \epsilon'_j + \kappa_i \kappa_j = \delta_{ij} \quad (53)$$

d'où l'on déduit

$$\sum_{\epsilon \perp k} \epsilon_i \epsilon_j = \epsilon_i \epsilon_j + \epsilon'_i \epsilon'_j = \delta_{ij} - \kappa_i \kappa_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (54)$$

et par suite

$$\sum_{\epsilon \perp k} |\epsilon \cdot X|^2 = X \cdot X^* - \frac{(k \cdot X)(k \cdot X^*)}{k^2} \quad (55)$$

e) CAS OÙ L'ÉTAT INITIAL ET L'ÉTAT FINAL APPARTIENNENT TOUS DEUX À UN CONTINUUM

Dans ce cas, l'état initial $|\varphi_i\rangle$ est lui aussi non physique (puisque de norme infinie). Il est possible cependant de lui associer une quantité ayant un sens physique, comme un flux de particules, si $|\varphi_i\rangle$ représente une particule libre incidente d'impulsion bien définie.

Calculons un tel flux incident pour une particule de masse M et pour un photon. Il est alors particulièrement commode d'utiliser des états discrétisés dans un cube de côté L . Dans l'état discrétilisé $|\mathbf{p}_i\rangle$ ou $|\mathbf{k}_i\rangle$, qui est de norme 1, la densité de particules est $1/L^3$ (une particule dans un volume L^3) et la vitesse vaut $\mathbf{p}_i/M = \hbar \mathbf{k}_i/M$ pour la particule de masse M , $c \mathbf{k}_i$ pour le photon (où $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_i/k_i$). On en déduit que le flux incident Φ_i vaut

$$\Phi_i = \frac{\mathbf{p}_i}{M} \frac{1}{L^3} = \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{M} \frac{1}{L^3} \quad (56)$$

pour la particule de masse M et

$$\Phi_i = \frac{c}{L^3} \mathbf{k}_i \quad (57)$$

pour le photon. La division par $|\Phi_i|$ de la probabilité de transition par unité de temps et par unité d'angle solide donne alors la section efficace différentielle de diffusion de \mathbf{k}_i vers \mathbf{k}_f .

Remarque

Si $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ appartiennent tous deux à un continuum, il apparaît deux facteurs $1/L^3$ dans l'élément de matrice au carré de (51). Un facteur $1/L^3$ est compensé par le facteur L^3 qui apparaît dans la densité d'états finals (voir remarque du paragraphe 3-c précédent). L'autre facteur $1/L^3$ compense celui figurant dans l'expression (56) ou (57) du flux, lors de la division de $\delta w/\delta\Omega$ par ce flux. Il apparaît ainsi clairement que la section efficace de diffusion ne dépend pas de L .

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

Même bibliographie que dans le chapitre I.

COMPLÉMENT B_I DESCRIPTION DE L'EFFET D'UNE PERTURBATION
PAR UN HAMILTONIEN EFFECTIF

1. Introduction - But recherché

Pour beaucoup de systèmes, les états propres de l'hamiltonien H ne peuvent pas être déterminés exactement. Par contre, ceux d'un hamiltonien approché H_0 sont quelquefois connus. Ainsi, dans le cas de l'électrodynamique, nous avons vu dans la partie C du chapitre que l'hamiltonien était diagonalisable en l'absence de couplage entre les particules et le champ, ou encore en l'absence de couplage entre le champ transverse et les particules interagissant par la loi de Coulomb. Dans ce cas, une théorie des perturbations peut être utilisée pour déterminer les états propres de H , en prenant comme perturbation la différence entre H et H_0 .

Dans ce complément, nous considérons le cas d'un hamiltonien H_0 dont les niveaux d'énergie $E_{i\alpha}$ se groupent en multiplicités $\mathcal{E}_\alpha^0, \mathcal{E}_\beta^0, \dots$ bien séparées les unes des autres. L'indice latin i repère les différents niveaux $|i, \alpha\rangle$ d'une même multiplicité, et P_α est le projecteur sur la multiplicité \mathcal{E}_α^0 .

$$H_0|i, \alpha\rangle = E_{i\alpha}|i, \alpha\rangle \quad (1)$$

$$P_\alpha = \sum_i |i, \alpha\rangle \langle i, \alpha| \quad (2)$$

Dire que les multiplicités sont bien séparées signifie que le spectre de H_0 a la forme indiquée sur la figure 1. De manière plus précise, nous supposons :

$$|E_{i\alpha} - E_{j\alpha}| \ll |E_{i\alpha} - E_{j\beta}| \quad \text{avec } \alpha \neq \beta \quad (3)$$

En termes physiques, le nombre quantique i caractérise des degrés de liberté dont les fréquences de Bohr, $(E_{i\alpha} - E_{j\alpha})/\hbar$ (écart entre

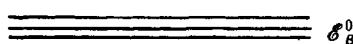
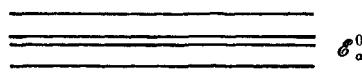


Figure 1. Multiplicités $\mathcal{E}_\alpha^0, \mathcal{E}_\beta^0 \dots$ de l'hamiltonien H_0 .

niveaux d'une même multiplicité) sont petites. Au contraire, l'indice α est un nombre quantique relatif à des grandeurs dont les fréquences de Bohr ($E_{i\alpha} - E_{j\beta}/\hbar$) (écart entre deux multiplicités différentes) sont bien plus grandes. Ainsi, l'existence de multiplicité bien séparées révèle la présence dans le système de deux types de degrés de liberté : des degrés de liberté rapides caractérisés par l'indice grec α , et des degrés de liberté lents caractérisés par l'indice latin i .

Des situations de ce type se rencontrent dans de nombreux problèmes physiques, et notamment dans l'étude des interactions entre matière et rayonnement. Considérons par exemple le système formé, d'une part par un électron dans un potentiel statique extérieur et d'autre part par un mode $\mathbf{k}\epsilon$ du champ de rayonnement de fréquence ω . En l'absence d'interaction entre l'électron et le rayonnement, les niveaux d'énergie du système global sont repérés par les nombres quantiques i de l'électron dans le potentiel extérieur et le nombre $\alpha = N$ de photons dans le mode. Si la fréquence ω du mode considéré est très grande devant les fréquences $(E_i - E_j)/\hbar$ caractérisant le mouvement de l'électron dans le potentiel extérieur, nous sommes dans une situation analogue à celle de la figure 1. Les multiplicités $\mathcal{E}_\alpha^0 = \mathcal{E}_N^0$ regroupent alors les niveaux d'énergie de l'électron dans le potentiel extérieur en présence de N photons et les autres multiplicités correspondant à un nombre $N' \neq N$ de photons sont à une distance $(N' - N)\hbar\omega$.

Pour obtenir l'hamiltonien total H , ajoutons maintenant à H_0 la perturbation ou le couplage que nous écrirons sous la forme λV , où λ est un paramètre sans dimension :

$$H = H_0 + \lambda V \quad (4)$$

L'opérateur V a des éléments de matrice aussi bien à l'intérieur d'une multiplicité qu'entre deux multiplicités différentes. Par exemple, pour le système mentionné plus haut, l'interaction entre l'électron et le mode $\mathbf{k}\epsilon$ couple la multiplicité \mathcal{E}_N^0 aux multiplicités \mathcal{E}_{N+1}^0 (et \mathcal{E}_{N-1}^0), les processus physiques correspondants étant l'émission (et l'absorption) d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ par l'électron. Si λ est suffisamment petit, de manière plus précise, si

$$|\langle i, \alpha | \lambda V | j, \beta \rangle| \ll |E_{i\alpha} - E_{j\beta}| \quad (\beta \neq \alpha) \quad (5)$$

les niveaux d'énergie de l'hamiltonien H se grouperont, comme ceux de H_0 , en multiplicités $\mathcal{E}_\alpha^0, \mathcal{E}_\beta^0 \dots$ bien séparées les unes des autres, les niveaux de \mathcal{E}_α^0 tendant vers ceux de \mathcal{E}_α^0 quand $\lambda \rightarrow 0$.

Les effets physiques du couplage λV sont de deux sortes. D'une part, les fonctions d'onde sont modifiées. En particulier, les fonctions d'onde de la multiplicité \mathcal{E}_α^0 sont « contaminées » par les fonctions d'onde des autres multiplicités \mathcal{E}_β^0 avec $\beta \neq \alpha$. D'autre part, les énergies sont modifiées. En particulier, les fréquences de Bohr lentes (à l'intérieur

d'une multiplicité) sont changées. Etudions de plus près ces deux types d'effet dans le cas de l'exemple physique introduit plus haut. Par suite de la contamination des états de \mathcal{E}_N^0 par ceux de $\mathcal{E}_{N \pm 1}^0$, N n'est plus un bon nombre quantique, et les observables électroniques, qui commutent avec l'opérateur nombre de photons, peuvent alors avoir des éléments de matrice non nuls entre états perturbés de \mathcal{E}_N^0 et états perturbés de $\mathcal{E}_{N \pm 1}^0$. Physiquement, il apparaît dans le mouvement de l'électron des composantes rapides à la fréquence ω qui correspondent en fait à la vibration de l'électron dans le champ électrique du mode $k\epsilon$. Par ailleurs, le couplage non résonnant entre \mathcal{E}_N^0 et $\mathcal{E}_{N \pm 1}^0$ déplace au second ordre en λV les états de \mathcal{E}_N^0 . Physiquement, l'émission et la réabsorption virtuelles (ou l'absorption et la réémission virtuelles) d'un photon par l'électron change le mouvement lent de l'électron dans le potentiel extérieur.

Dans ce complément, nous nous intéressons essentiellement à la modification apportée au mouvement lent par le couplage λV et non à la contamination des fonctions d'onde. Notre but est d'essayer de construire un hamiltonien n'agissant qu'à l'intérieur de chaque multiplicité \mathcal{E}_α^0 et tel que ses valeurs propres dans \mathcal{E}_α^0 coïncident avec celles de H dans \mathcal{E}_α . Un tel hamiltonien, appelé hamiltonien effectif, n'agit que sur les degrés de liberté lents puisque ses éléments de matrice entre $\langle i, \alpha |$ et $| j, \beta \rangle$ sont nuls si $\alpha \neq \beta$. Comme il décrit correctement le mouvement lent, il incorpore l'effet sur les degrés de liberté lents du couplage de ces derniers avec les degrés de liberté rapides. Dans le cas du système physique considéré plus haut, l'hamiltonien effectif est un hamiltonien *purement électronique* qui décrit le mouvement lent perturbé de l'électron au moyen de termes correctifs électroniques : correction à l'énergie cinétique de l'électron (due au fait qu'il est alourdi par le nuage de photons virtuels qui l'entourent), correction à l'énergie potentielle (due au fait que l'électron vibrant dans le champ du mode ω moyenne le potentiel statique extérieur sur l'étendue de son mouvement de vibration)... D'autres exemples physiques importants pourraient être donnés comme l'*interaction magnétique effective* entre deux électrons (associée à l'émission virtuelle d'un photon transverse par un électron et à la réabsorption de ce photon par l'autre -voir chapitre II, partie F).

Nous montrons dans ce complément comment construire un hamiltonien effectif au moyen d'une transformation unitaire appliquée à l'hamiltonien total H (*). Le principe de la méthode est exposé au

(*) Une revue sur les différentes façons de construire formellement des hamiltoniens effectifs peut être trouvée dans D.J. Klein, J. Chem. Phys. 61, 786 (1974). Une référence plus récente donne explicitement les termes de l'hamiltonien effectif jusqu'à l'ordre 5 : I. Shavitt and L.T. Redmon, J. Chem. Phys. 73, 5711 (1980).

paragraphe 2. Nous déterminons ensuite (§ 3) la transformation unitaire et l'expression de l'hamiltonien effectif. Nous étudions enfin (§ 4) le cas où le système étudié est un ensemble de deux sous-systèmes dont l'interaction est décrite par le couplage λV . Nous montrons en particulier comment il est possible d'obtenir pour l'hamiltonien effectif une expression opératorielle ne faisant intervenir que les observables du système évoluant avec des fréquences lentes.

2. Principe de la méthode

Nous cherchons donc un hamiltonien effectif H' ayant les propriétés suivantes :

- a) H' est hermitique
- b) H' a les mêmes valeurs propres que H , avec la même dégénérescence
- c) H' n'a pas d'éléments de matrice entre les multiplicités *non perturbées* $\mathcal{E}_\alpha^0, \mathcal{E}_\beta^0, \dots$

Les propriétés a) et b) entraînent qu'il existe une transformation unitaire

$$T = e^{iS} \quad (6)$$

$$S = S^+ \quad (7)$$

qui permet de passer de H à H'

$$H' = T H T^+ \quad (8)$$

La propriété c) se traduit par l'équation

$$P_\alpha H' P_\beta = 0 \quad \text{pour } \alpha \neq \beta \quad (9)$$

La matrice représentant H' dans la base non perturbée initiale $|i, \alpha\rangle$ est diagonale par blocs. Chaque bloc est relatif à une multiplicité \mathcal{E}_α^0 et représente un hamiltonien effectif H_{eff}^α qui décrit les niveaux perturbés de cette multiplicité

$$H' = \sum_\alpha P_\alpha H_{eff}^\alpha \quad (10)$$

Les équations (8) et (9) ne sont pas suffisantes pour déterminer entièrement la transformation T . En effet, si T est une solution, on peut construire une infinité d'autres solutions de la forme UT , où U est une transformation unitaire quelconque agissant seulement à l'intérieur des multiplicités \mathcal{E}_α^0 . Une façon de lever cette indétermina-

tion est d'imposer à S de ne pas avoir d'éléments de matrice à l'intérieur de chaque multiplicité :

$$P_\alpha S P_\alpha = 0 \quad \text{pour tout } \alpha \quad (11)$$

Pour calculer explicitement S , il est commode de l'écrire sous forme d'un développement en puissances de λ

$$S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots + \lambda^n S_n + \dots \quad (12)$$

Il est évident que le terme d'ordre 0 est nul, puisque H_0 est lui-même diagonal dans la base $\{ |i, \alpha\rangle \}$. L'équation (8) peut alors se développer sous la forme

$$H' = H + [iS, H] + \frac{1}{2!} [iS, [iS, H]] + \frac{1}{3!} [iS, [iS, [iS, H]]] + \dots \quad (13)$$

En y portant l'expression (12) de S , on obtient un développement de l'hamiltonien effectif

$$H' = H_0 + \lambda H'_1 + \lambda^2 H'_2 + \dots + \lambda^p H'_p + \dots \quad (14)$$

Chacun des termes H'_p s'exprime en fonction des S_n , de H_0 et de V . Les conditions (9) et (11), appliquées ordre par ordre, déterminent alors les S_n , et par conséquent H' .

Il est intéressant d'écrire l'hamiltonien effectif H' ainsi déterminé sous la forme

$$H' = H_0 + W \quad (15)$$

où

$$W = \lambda H'_1 + \lambda^2 H'_2 + \dots + \lambda^p H'_p + \dots \quad (16)$$

W est appelé l'opérateur de « déplacement des niveaux ». D'après la propriété b) de H' , W produit sur les niveaux d'énergie de H_0 exactement le même effet que la perturbation λV . Par contre, d'après la propriété c), il a l'avantage de n'agir qu'à l'intérieur des multiplicités. Si l'on cherche uniquement les nouvelles énergies dans la multiplicité \mathcal{E}_α^0 , il est beaucoup plus simple d'utiliser W que λV , qui couple \mathcal{E}_α^0 à toutes les autres multiplicités.

3. Détermination de l'hamiltonien effectif

a) CALCUL DE S ORDRE PAR ORDRE

Ordonnons l'expression (13) de H' suivant les puissances croissantes de λ , après avoir remplacé S par son développement (12) et

H par son expression (4). Il vient :

$$\begin{aligned}
 H' = & H_0 + \\
 & + [i\lambda S_1, H_0] + \lambda V + \\
 & + [i\lambda^2 S_2, H_0] + [i\lambda S_1, \lambda V] + \frac{1}{2} [i\lambda S_1, [i\lambda S_1, H_0]] + \\
 & : \\
 & + [i\lambda^n S_n, H_0] + [i\lambda^{n-1} S_{n-1}, \lambda V] + \frac{1}{2} [i\lambda^{n-1} S_{n-1}, [i\lambda S_1, H_0]] + \\
 & + \frac{1}{2} [i\lambda S_1, [i\lambda^{n-1} S_{n-1}, H_0]] + \cdots + \frac{1}{n!} [i\lambda S_1, [i\lambda S_1, \cdots [i\lambda S_1, H_0] \cdots]] + \\
 & + \cdots
 \end{aligned} \tag{17}$$

Le dernier terme de (17) contient n commutateurs emboités.

Considérons d'abord les termes d'ordre 1 en λ :

$$\lambda H'_1 = [i\lambda S_1, H_0] + \lambda V \tag{18}$$

et écrivons que l'élément de matrice de H'_1 entre deux multiplicités différentes est nulle. Nous obtenons l'équation

$$\langle i, \alpha | i\lambda S_1 | j, \beta \rangle (E_{j\beta} - E_{i\alpha}) + \langle i, \alpha | \lambda V | j, \beta \rangle = 0 \tag{19}$$

qui détermine les éléments de matrice de S_1 entre deux multiplicités différentes, les autres éléments étant nuls d'après (11).

$$\langle i, \alpha | i\lambda S_1 | j, \beta \rangle = \frac{\langle i, \alpha | \lambda V | j, \beta \rangle}{E_{i\alpha} - E_{j\beta}} \text{ pour } \alpha \neq \beta \tag{20.a}$$

$$\langle i, \alpha | i\lambda S_1 | j, \alpha \rangle = 0 \tag{20.b}$$

Considérons maintenant le terme d'ordre n , $\lambda^n H'_n$. Il fait intervenir tous les opérateurs S_p , p allant de 1 à n . La nullité des éléments de matrice de $\lambda^n H'_n$ entre deux multiplicités différentes α et β permet d'exprimer les éléments de matrice de $\lambda^n S_n$ entre ces mêmes multiplicités, en fonction de ceux des opérateurs S_p d'ordre inférieur à n . En effet, $\lambda^n S_n$ ne figure que dans un seul terme, celui du commutateur avec H_0 . On obtient une équation du type

$$\langle i, \alpha | i\lambda^n S_n | j, \beta \rangle (E_{j\beta} - E_{i\alpha}) = \mathcal{F}(\lambda V; \lambda S_1, \cdots, \lambda^{n-1} S_{n-1}) \text{ pour } \alpha \neq \beta \tag{21.a}$$

avec de plus

$$\langle i, \alpha | i\lambda^n S_n | j, \alpha \rangle = 0 \tag{21.b}$$

De proche en proche, S est ainsi entièrement déterminé.

b) EXPRESSION DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF À L'ORDRE 2

Remarquons tout d'abord que l'expression de l'hamiltonien effectif à l'ordre n ne fait pas intervenir λS_n . En effet, nous avons déjà vu que, dans l'expression du terme d'ordre n de (17), S_n n'intervient que dans le commutateur simple avec H_0 . Comme H_0 est diagonal vis à vis de α et que S_n est non diagonal, un tel commutateur est non diagonal et ne contribue donc pas à l'expression de H' à l'intérieur de chaque multiplicité. Ainsi, pour déterminer l'hamiltonien effectif jusqu'à l'ordre 2, il suffit donc de connaître λS_1 , qui est donné par (20.a). Les éléments de matrice de H' dans la multiplicité α s'écrivent :

$$\begin{aligned} \langle i | H_{eff}^\alpha | j \rangle &= \langle i, \alpha | H' | j, \alpha \rangle = \\ &= \langle i, \alpha | H_0 + \lambda V + [i \lambda S_1, \lambda V] + \frac{1}{2} [i \lambda S_1, [i \lambda S_1, H_0]] + \dots | j, \alpha \rangle \end{aligned} \quad (22)$$

Montrons que le dernier terme de (22) est identique, à un facteur près, à l'avant-dernier. En effet $[i \lambda S_1, H_0]$ est purement non diagonal, et d'après (19), ses éléments de matrices sont opposés de ceux de λV entre multiplicités différentes. Notons λV^{nd} la partie non diagonale (qui relie des multiplicités différentes) de λV . On a donc :

$$[i \lambda S_1, H_0] + \lambda V^{nd} = 0 \quad (23)$$

et le dernier terme de (22) se réduit à $-[i \lambda S_1, \lambda V^{nd}]/2$. L'avant-dernier terme ne fait lui aussi intervenir que la partie non diagonale de λV , de façon que le produit par λS_1 donne un terme diagonal. Ainsi, à l'ordre 2, H_{eff}^α se réduit à :

$$H_{eff}^\alpha = H_0 P_\alpha + P_\alpha \lambda V P_\alpha + \frac{1}{2} P_\alpha [i \lambda S_1, \lambda V] P_\alpha + \dots \quad (24)$$

Des simplifications analogues interviennent à tous les ordres.

Calculons explicitement les éléments de matrices du dernier terme de (24) en utilisant les éléments de matrice (20.a) de λS_1 :

$$\begin{aligned} \langle i, \alpha | [i \lambda S_1, \lambda V] | j, \alpha \rangle &= \sum_{k, \gamma \neq \alpha} \langle i, \alpha | i \lambda S_1 | k, \gamma \rangle \langle k, \gamma | \lambda V | j, \alpha \rangle - \\ &- \langle i, \alpha | \lambda V | k, \gamma \rangle \langle k, \gamma | i \lambda S_1 | j, \alpha \rangle = \\ &= \sum_{k, \gamma \neq \alpha} \langle i, \alpha | \lambda V | k, \gamma \rangle \langle k, \gamma | \lambda V | j, \alpha \rangle \left[\frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\gamma}} + \frac{1}{E_{j\alpha} - E_{k\gamma}} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

Il vient finalement pour $\langle i | H_{eff}^\alpha | j \rangle$, à l'ordre 2 inclus en λ :

$$\begin{aligned} \langle i | H_{eff}^\alpha | j \rangle &= E_{i\alpha} \delta_{ij} + \langle i, \alpha | \lambda V | j, \alpha \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k, \gamma \neq \alpha} \langle i, \alpha | \lambda V | k, \gamma \rangle \langle k, \gamma | \lambda V | j, \alpha \rangle \left[\frac{1}{E_{i\alpha} - E_{k\gamma}} + \frac{1}{E_{j\alpha} - E_{k\gamma}} \right] + \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (26)$$

Le premier terme de (26) représente l'énergie non perturbée des niveaux de \mathcal{E}_α^0 , le second le couplage *direct* entre les niveaux i et j de \mathcal{E}_α^0 , le troisième, le couplage *indirect* entre ces deux niveaux via tous les niveaux $k\gamma$ des autres multiplicités \mathcal{E}_γ^0 . Ce dernier terme a la structure d'un terme de perturbation du second ordre, à savoir un produit de deux éléments de matrice de λV divisé par un dénominateur d'énergie non perturbée (les deux énergies $E_{i\alpha}$ et $E_{j\alpha}$ des deux niveaux de \mathcal{E}_α^0 intervenant de manière symétrique si elles sont différentes).

c) TERMES D'ORDRE SUPÉRIEUR

Nous avons vu que, de proche en proche, les termes d'ordre supérieurs peuvent être calculés explicitement. En fait, au moins d'un point de vue formel, l'expression de l'hamiltonien effectif peut être aussi donnée sous des formes algébriques compactes. On pourra trouver ces deux types d'expressions dans les références citées au début de ce complément.

4. Cas de deux systèmes en interaction

Nous envisageons maintenant le cas de deux systèmes \mathcal{A} et \mathcal{R} , d'hamiltoniens respectifs H_A et H_R , et interagissant par un hamiltonien λV . Les écarts entre les niveaux d'énergie relatifs à \mathcal{R} sont supposés grands par rapport à ceux de \mathcal{A} . Ceci se traduit par les équations suivantes :

$$H_0 = H_A + H_R \quad (27)$$

$$H_A |i\rangle = E_i |i\rangle \quad (28)$$

$$H_R |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle \quad (29)$$

$$|E_i - E_j| \ll |E_\alpha - E_\beta| \quad \alpha \neq \beta \quad (30)$$

Nous supposerons que le couplage entre les deux systèmes se met sous la forme :

$$\lambda V = \lambda \sum_\mu A_\mu R_\mu \quad (31)$$

où les opérateurs A_μ (resp. R_μ) sont relatifs au sous-système

\mathcal{A} (resp. \mathcal{R}). On suppose enfin A_μ et R_μ purement *non diagonaux* dans les bases $\{ |i\rangle \}$ et $\{ |\alpha\rangle \}$.

Pour déterminer H_{eff}^α , remplaçons dans (26) $E_{i\alpha}$ par $E_i + E_\alpha$, λV par son expression (31). Comme R_μ est non diagonal en α , le second terme de (26) est nul. Il vient ainsi :

$$\begin{aligned} \langle i | H_{eff}^\alpha | j \rangle &= E_\alpha + E_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'} \sum_{k,\gamma \neq \alpha} \\ &(\langle \alpha | \lambda R_\mu | \gamma \rangle \langle \gamma | \lambda R_{\mu'} | \alpha \rangle) (\langle i | A_\mu | k \rangle \langle k | A_{\mu'} | j \rangle) \times \\ &\times \left[\frac{1}{E_\alpha - E_\gamma + E_i - E_k} + \frac{1}{E_\alpha - E_\gamma + E_j - E_k} \right] \end{aligned} \quad (32)$$

En tirant partie de l'inégalité (30), on peut développer les fractions apparaissant dans (32)

$$\frac{1}{E_\alpha - E_\gamma + E_i - E_k} = \frac{1}{E_\alpha - E_\gamma} - \frac{E_i - E_k}{(E_\alpha - E_\gamma)^2} + \dots \quad (33)$$

et l'équivalent en remplaçant i par j . Le terme du deuxième ordre devient :

$$\begin{aligned} &\sum_{\mu\mu'} \left(\sum_{\gamma \neq \alpha} \langle \alpha | \lambda R_\mu | \gamma \rangle \frac{1}{E_\alpha - E_\gamma} \langle \gamma | \lambda R_{\mu'} | \alpha \rangle \right) \times \\ &\times \left(\sum_k \langle i | A_\mu | k \rangle \langle k | A_{\mu'} | j \rangle \right) + \\ &+ \sum_{\mu\mu'} \left(\sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | \lambda R_\mu | \gamma \rangle \langle \gamma | \lambda R_{\mu'} | \alpha \rangle}{(E_\alpha - E_\gamma)^2} \right) \times \\ &\times \left(\sum_k \langle i | A_\mu | k \rangle \langle k | A_{\mu'} | j \rangle \left(\frac{E_k - E_i + E_k - E_j}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (34)$$

Notons que la somme sur γ peut être étendue au cas $\gamma = \alpha$, car les termes correspondants $\langle \alpha | R_\mu | \alpha \rangle$ sont nuls. Les relations de fermeture sur les états $|\gamma\rangle$ d'une part, et $|k\rangle$ d'autre part permettent alors de réécrire ces deux termes sous des formes opératorielles. En effet

$$\begin{aligned} &\sum_k \langle i | A_\mu | k \rangle \langle k | A_{\mu'} | j \rangle (E_k - E_i + E_k - E_j) \\ &= \langle i | [A_\mu, H_A] A_{\mu'} - A_\mu [A_{\mu'}, H_A] | j \rangle \end{aligned} \quad (35)$$

L'hamiltonien effectif peut finalement être écrit sous forme opératoire :

$$\begin{aligned}
 H_{eff}^\alpha = & E_\alpha \mathbb{1}_A + H_A + \sum_{\mu\mu'} \langle \alpha | \lambda R_\mu \frac{1}{E_\alpha - H_R} \lambda R_{\mu'} | \alpha \rangle A_\mu A_{\mu'} + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'} \langle \alpha | \lambda R_\mu \frac{1}{(E_\alpha - H_R)^2} \lambda R_{\mu'} | \alpha \rangle ([A_\mu, H_A] A_{\mu'} - A_\mu [A_{\mu'}, H_A]) + \\
 & + \dots
 \end{aligned} \tag{36}$$

Il apparaît bien effectivement comme une somme d'opérateurs relatifs à \mathcal{A} , multipliés éventuellement par des coefficients qui sont la valeur moyenne dans l'état $|\alpha\rangle$ d'opérateurs relatifs à \mathcal{R} . Les deux premiers termes représentent l'évolution libre dans la multiplicité \mathcal{C}_α^0 . Le troisième décrit l'effet des transitions virtuelles vers les autres multiplicités. Le dernier terme de (36) est une correction au troisième terme prenant en compte le fait qu'une transition virtuelle vers la multiplicité β n'est pas infiniment courte mais dure un temps de l'ordre de $\hbar/|E_\alpha - E_\beta|$. Les opérateurs A_μ et $A_{\mu'}$ ont le temps d'évoluer sous l'action de H_A pendant cette durée, ce qu'exprime le dernier terme de (36).

COMPLÉMENT C_I

**NIVEAU DISCRET COUPLÉ A UN CONTINUUM LARGE
ÉTUDE D'UN MODÈLE SIMPLE**

De nombreux processus d'interaction entre atomes et photons peuvent être analysés en termes de niveau discret couplé à un continuum. Il s'avère souvent qu'une compréhension satisfaisante de ces processus ne peut être obtenue que si l'on maîtrise les caractéristiques essentielles des nouveaux états propres résultant du couplage entre l'état discret et le continuum. Il nous a donc semblé important de consacrer un complément à l'analyse d'un tel problème. Les résultats obtenus permettront d'éclairer plusieurs des discussions du chapitre II.

Plutôt que de considérer le problème dans toute sa généralité, nous avons préféré nous limiter, dans la plus grande partie de ce complément, à un modèle suffisamment simple pour que le formalisme ne soit pas un obstacle majeur. Ce modèle ne saurait, bien entendu, rendre compte de tous les détails des phénomènes, mais nous verrons qu'il permet de cerner et de comprendre les aspects essentiels du problème.

Nous commençons (§ 1) par décrire le modèle et les hypothèses simplificatrices qui consistent à prendre un continuum s'étendant de $-\infty$ à $+\infty$ sur l'axe des énergies et un couplage avec l'état discret indépendant de l'énergie. « Vu » de l'état discret, le continuum apparaît dans ce cas comme parfaitement « plat » et sans structure. Il est possible alors, après « discréétisation » du continuum, de calculer exactement les états propres et valeurs propres de l'hamiltonien total. Le résultat essentiel est que la contamination des nouveaux états propres par l'état discret n'est importante que dans un intervalle, centré sur l'énergie de l'état discret, et dont la largeur est de l'ordre de $\hbar\Gamma$, où Γ est la probabilité de transition par unité de temps de l'état discret vers le continuum calculée par la règle d'or de Fermi (§ 2). Nous montrons ensuite (§ 3) comment cette « dissolution » de l'état discret, sur un intervalle de largeur $\hbar\Gamma$ dans le nouveau continuum, permet de comprendre quantitativement plusieurs phénomènes physiques importants, comme la décroissance exponentielle de l'état discret, l'excitation de cet état discret à partir d'un autre état du système, la diffusion résonnante via cet état discret ou les profils de Fano. Le dernier paragraphe (§ 4) donne enfin quelques indications sur la façon dont les états propres du nouveau continuum peuvent être calculés dans des situations plus générales (continuum non plat) et sans discréétisation du continuum.

1. Description du modèle (*)

a) ETAT DISCRET ET CONTINUUM

Considérons un hamiltonien H_0 qui a pour états propres un état discret $|\varphi\rangle$ et un continuum d'états $|E,\beta\rangle$. Pour l'état $|E,\beta\rangle$, E désigne la valeur propre associée à H_0 (énergie non perturbée) et β les autres nombres quantiques permettant de distinguer des états orthogonaux de même énergie.

Supposons que l'état discret $|\varphi\rangle$ soit couplé au continuum $|E,\beta\rangle$ par un hamiltonien de couplage V , tel que $\langle E',\beta' | V | E,\beta \rangle$. Il est toujours possible de faire un changement de base à l'intérieur de chaque sous-espace d'énergie E du continuum afin de séparer la combinaison linéaire des états $|E,\beta\rangle$ coupléed à $|\varphi\rangle$, que l'on notera $|E\rangle$, des combinaisons linéaires orthogonales non couplées. Nous noterons v_E l'élément de matrice $\langle E | V | \varphi \rangle$. La connaissance des valeurs propres et des vecteurs propres de l'hamiltonien total permet de déterminer la dynamique du système. Il convient donc de diagonaliser l'hamiltonien total dans la base $\{| \varphi \rangle, | E \rangle, \dots\}$ (**).

Auparavant, nous allons introduire un certain nombre de simplifications permettant d'alléger au maximum les calculs tout en conservant les résultats physiques essentiels.

b) DISCRÉTISATION DU CONTINUUM

Nous allons tout d'abord « discréter » le continuum. Une telle démarche a été présentée dans le chapitre pour le champ électromagnétique, avec l'introduction d'une boîte fictive et de conditions aux limites périodiques sur les parois de cette boîte. Si la dimension L de la boîte est grande devant toutes les grandeurs caractéristiques du problème, les résultats physiques ne dépendent pas du volume L^3 et sont obtenus à la limite $1/L^3 \rightarrow 0$.

Nous procédons ici de façon analogue et remplaçons les états du continuum $|E\rangle$ par des états discrets $|k\rangle$ distants de δ en énergie. La densité d'états est donc $1/\delta$. L'élément de matrice $\langle k | V | \varphi \rangle$ est noté v_k . Les résultats physiques sont obtenus à la limite $\delta \rightarrow 0$.

L'application de la règle d'or de Fermi pour un système initialement dans l'état $|\varphi\rangle$ conduit à une probabilité de transition par unité de temps Γ vers le continuum égale à :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} v^2 \frac{1}{\delta} \quad (1)$$

(*) Un tel modèle a été introduit par U. Fano, Nuovo Cimento, **12**, 156 (1935).

(**) Les combinaisons linéaires d'états $|E,\beta\rangle$, de même énergie E , qui ne sont pas couplées à l'état discret $|\varphi\rangle$ restent des états propres de l'hamiltonien total, de valeur propre E .

où v est l'élément de matrice (supposé réel) de V entre $|\varphi\rangle$ et l'état $|k\rangle$ de même énergie que $|\varphi\rangle$. La formule (1) montre clairement que, lors du passage à la limite $\delta \rightarrow 0$, v^2/δ doit rester constant et égal à $\hbar\Gamma/2\pi$.

c) HYPOTHÈSES SIMPLIFICATRICES

Nous supposons tout d'abord que le continuum discrétilisé s'étend de $-\infty$ à $+\infty$ avec des niveaux équidistants séparés par la quantité δ . L'énergie non perturbée du niveau $|k\rangle$ est donc :

$$\langle k | H_0 | k \rangle = E_k = k \delta \quad (2.a)$$

où k est un nombre entier quelconque positif, négatif ou nul. Dans toute la suite, l'énergie E_φ du niveau discret est prise à l'origine des énergies ($E_\varphi = 0$) et coïncide donc avec l'énergie du niveau $k = 0$ du quasi-continuum.

$$\langle \varphi | H_0 | \varphi \rangle = E_\varphi = 0 \quad (2.b)$$

Pour le couplage, nous supposons que tous les éléments de matrice de V entre le niveau $|\varphi\rangle$ et les états $|k\rangle$ sont égaux et réels

$$v_k = \langle k | V | \varphi \rangle = \langle \varphi | V | k \rangle = v \quad (2.c)$$

Enfin, tous les autres éléments de matrice de V sont supposés nuls :

$$\langle \varphi | V | \varphi \rangle = \langle k | V | k' \rangle = 0 \quad (2.d)$$

2. Etats stationnaires du système. Souvenir de l'état discret dans le nouveau continuum

a) EQUATION AUX VALEURS PROPRES

Soient E_μ et $|\psi_\mu\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien total $H = H_0 + V$.

$$H|\psi_\mu\rangle = E_\mu |\psi_\mu\rangle \quad (3)$$

Projetons l'équation (3) respectivement sur $\langle k |$ et $\langle \varphi |$. Il vient alors, compte tenu des hypothèses faites sur H_0 et V (voir formules 2) :

$$E_k \langle k | \psi_\mu \rangle + v \langle \varphi | \psi_\mu \rangle = E_\mu \langle k | \psi_\mu \rangle \quad (4.a)$$

$$\sum_k v \langle k | \psi_\mu \rangle = E_\mu \langle \varphi | \psi_\mu \rangle \quad (4.b)$$

L'équation (4.a) donne (*):

$$\langle k | \psi_\mu \rangle = v \frac{\langle \varphi | \psi_\mu \rangle}{E_\mu - E_k} \quad (5)$$

(*) Nous verrons plus loin que $E_\mu - E_k$ est toujours non nul.

expression qui, une fois portée dans (4.b), fournit l'équation aux valeurs propres :

$$\sum_k \frac{v^2}{E_\mu - E_k} = E_\mu \quad (6)$$

Par ailleurs, en utilisant (5) et la condition de normalisation

$$\sum_k |\langle k | \psi_\mu \rangle|^2 + |\langle \varphi | \psi_\mu \rangle|^2 = 1 \quad (7)$$

nous trouvons pour les composantes de $|\psi_\mu\rangle$ sur $|\varphi\rangle$ et $|k\rangle$ (avec un choix de phase convenable) :

$$\langle \varphi | \psi_\mu \rangle = \frac{1}{\left[1 + \sum_{k'} \left(\frac{v}{E_\mu - E_{k'}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (8.a)$$

$$\langle k | \psi_\mu \rangle = \frac{v/(E_\mu - E_k)}{\left[1 + \sum_{k'} \left(\frac{v}{E_\mu - E_{k'}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (8.b)$$

Revenons à l'équation aux valeurs propres (6). Elle fait intervenir une série de la forme $\sum_k (z - k)^{-1}$ avec $z = E_\mu/\delta$. De façon analogue, dans les expressions (8.a) et (8.b) des composantes des vecteurs propres apparaît la somme $\sum_k (z - k)^{-2}$. Or, il est possible de montrer que (*) :

$$\sum_k (z - k)^{-2} = \frac{\pi^2}{\sin^2 \pi z} = \pi^2 (1 + \cotg^2 \pi z) \quad (9)$$

équation qui donne par intégration

$$\sum_k (z - k)^{-1} = \pi \cotg \pi z \quad (10)$$

Il s'ensuit que l'équation aux valeurs propres (6) prend la forme plus simple :

$$\frac{v^2}{\delta} \pi \cotg \pi \frac{E_\mu}{\delta} = E_\mu \quad (11)$$

(*) Voir par exemple Cartan (chapitre V).

que nous transformons en utilisant (1) en :

$$\cotg \pi \frac{E_\mu}{\delta} = \frac{2 E_\mu}{\hbar \Gamma} \quad (12)$$

Introduisons enfin l'angle φ_μ défini par

$$\varphi_\mu = \text{Arctg} \frac{\hbar \Gamma}{2 E_\mu} \quad (13.a)$$

qui permet d'écrire la solution de (12) sous la forme

$$\frac{E_\mu}{\delta} = m + \frac{\varphi_\mu}{\pi} \quad (13.b)$$

où m est un entier (positif, négatif ou nul). Comme φ_μ est (par définition de la fonction Arctg) compris entre $-\pi/2$ et $\pi/2$, φ_μ/π est la différence entre E_μ/δ et l'entier le plus proche de E_μ/δ . Nous aurons l'occasion plus loin d'utiliser cet angle φ_μ .

b) DÉTERMINATION GRAPHIQUE DES NOUVELLES VALEURS PROPRES

Pour déterminer les valeurs propres de l'hamiltonien total, il faut résoudre l'équation (12), c'est-à-dire trouver les intersections de la droite $y = ax$ avec la courbe $y = \cotg bx$ (a et b étant égaux respectivement à $2/\hbar \Gamma$ et π/δ), ce qui peut être fait graphiquement (voir figure 1).

A chaque intersection M_k entre la droite $y = ax$ et la courbe $y = \cotg bx$ est associée une valeur propre $E_{\pm k}$ (les niveaux non perturbés sont repérés par un indice latin et les niveaux perturbés par l'indice grec correspondant). Il apparaît clairement sur la figure 1 que les nouvelles valeurs propres $E_{\pm k}$ sont intercalées entre les anciennes ($E_k < E_\kappa < E_{k+1}$ et $E_{-(k+1)} < E_{-\kappa} < E_{-k}$). Les états propres de H forment donc également un quasi-continuum dont la densité d'états est très voisine de $1/\delta$ (il y a un état propre par intervalle d'énergie δ).

Nous constatons également sur la figure 1 que, pour des valeurs de k suffisamment grandes, l'abscisse du point M_k diffère très peu de $k\delta$, de sorte que, en première approximation, nous avons $E_\kappa \approx E_k$. Cette relation est satisfaite lorsque, au niveau du point d'intersection, la courbe diffère très peu de son asymptote, c'est-à-dire lorsque la cotangente est grande, donc d'après (12), lorsque

$$E_\kappa \gg \hbar \Gamma \quad (14)$$

La présence du niveau discret ne modifie donc de façon importante les valeurs propres et les vecteurs propres du quasi-continuum que sur un

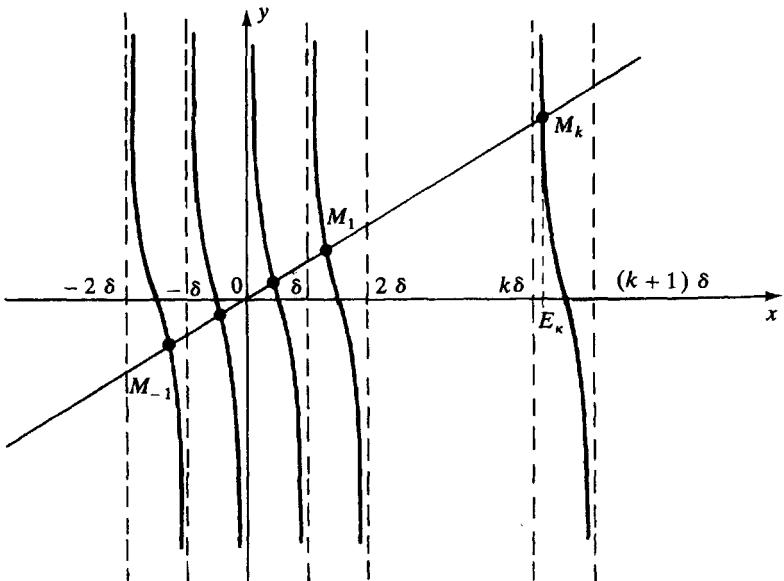


Figure 1. Détermination graphique des valeurs propres de H . L'abscisse de chaque point d'intersection entre la droite $y = 2x/\hbar\Gamma$ et la courbe $y = \cotg \pi x/\delta$ est une valeur propre de l'hamiltonien total. On appelle M_k (resp M_{-k}) le point d'intersection dont l'abscisse est comprise entre $k\delta$ et $(k + 1)\delta$ (resp $-(k + 1)\delta$ et $-k\delta$). La valeur propre associée est notée E_k (indice grec correspondant à l'indice latin k).

intervalle d'énergie de l'ordre de $\hbar\Gamma$ autour de l'énergie du niveau discret.

c) DENSITÉ DE PRÉSENCE DE L'ÉTAT DISCRET DANS LE NOUVEAU CONTINUUM

En présence du couplage V , l'état discret $|\varphi\rangle$ se trouve dilué dans les divers états $\{|\psi_\mu\rangle\}$ du quasi-continuum de H , la composante de $|\varphi\rangle$ dans l'état $|\psi_\mu\rangle$ étant donnée par le carré de l'expression (8.a). Pour transformer le dénominateur de cette expression, utilisons (9). Il vient :

$$\begin{aligned} 1 + v^2 \sum_k \left(\frac{1}{E_\mu - E_k} \right)^2 &= 1 + \frac{v^2}{\delta^2} \sum_k \left(\frac{E_\mu}{\delta} - k \right)^{-2} \\ &= 1 + \frac{\pi^2 v^2}{\delta^2} \left(1 + \cotg^2 \pi \frac{E_\mu}{\delta} \right) \quad (15) \end{aligned}$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (11) et (1)

$$1 + v^2 \sum_k \left(\frac{1}{E_\mu - E_k} \right)^2 = 1 + \frac{\pi^2 v^2}{\delta^2} + \frac{E_\mu^2}{v^2} = \frac{1}{v^2} \left[v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right] \quad (16)$$

ce qui donne finalement

$$\langle \varphi | \psi_\mu \rangle = \frac{v}{\left[v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (17)$$

Considérons alors un intervalle $[E, E + dE]$ avec dE grand devant δ , mais petit devant $\hbar\Gamma$. La probabilité dN_φ de trouver l'état discret $|\varphi\rangle$ dans cet intervalle vaut :

$$dN_\varphi = \sum_{E < E_\mu < E + dE} |\langle \varphi | \psi_\mu \rangle|^2 \simeq \frac{dE}{\delta} |\langle \varphi | \psi_\mu \rangle|^2 \quad (18)$$

ce qui donne, compte tenu de (17) et (1) :

$$\frac{dN_\varphi}{dE} = \frac{v^2 / \delta}{v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E^2} = \frac{\hbar\Gamma / 2\pi}{v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E^2} \quad (19)$$

A la limite $\delta \rightarrow 0$, v^2 tend vers 0 et l'expression (19) a pour limite

$$\frac{dN_\varphi}{dE} = \frac{\hbar\Gamma / 2\pi}{\frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E^2} \quad (20)$$

qui est une lorentzienne de largeur $\hbar\Gamma$, centrée en $E = E_\varphi = 0$ et dont l'intégrale sur E vaut 1.

Un tel résultat montre que, après couplage, le niveau discret $|\varphi\rangle$ est « dissous » dans le nouveau continuum sur un intervalle de largeur $\hbar\Gamma$. En d'autres termes, seuls les niveaux du nouveau continuum situés dans un intervalle de l'ordre de $\hbar\Gamma$ autour de E_φ conservent dans leur fonction d'onde le souvenir du niveau $|\varphi\rangle$.

3. Quelques applications de ce modèle simple

Nous montrons maintenant comment les résultats obtenus ci-dessus sur le nouveau continuum d'états $\{|\psi_\mu\rangle\}$ et sur la densité dN_φ/dE caractérisant le souvenir de l'état discret $|\varphi\rangle$ dans ce nouveau continuum permettent d'aborder de manière quantitative un certain nombre de problèmes.

a) DÉSINTÉGRATION DE L'ÉTAT DISCRET (*)

Essayons tout d'abord de calculer la probabilité pour que le système, préparé initialement (à $t = 0$) dans l'état discret $|\varphi\rangle$, y soit resté un instant t après. Utilisons pour cela la formule (17) et décomposons $|\varphi\rangle$ sur la base des états propres $|\psi_\mu\rangle$ de l'hamiltonien. Il vient :

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi\rangle = \sum_\mu \frac{v}{\left[v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |\psi_\mu\rangle \quad (21)$$

A l'instant t , l'état $|\psi(t)\rangle$ est devenu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\mu \frac{v e^{-iE_\mu t/\hbar}}{\left[v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |\psi_\mu\rangle \quad (22)$$

et l'amplitude de probabilité de trouver le système dans l'état $|\varphi\rangle$ est égale d'après (21) et (22) à :

$$\langle \varphi | \psi(t) \rangle = \sum_\mu \frac{v^2 e^{-iE_\mu t/\hbar}}{v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2} \quad (23)$$

que nous pouvons réécrire en remplaçant v^2 par $(\hbar\Gamma/2\pi)\delta$:

$$\langle \varphi | \psi(t) \rangle = \delta \sum_\mu \frac{(\hbar\Gamma/2\pi)e^{-iE_\mu t/\hbar}}{v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2} \quad (24)$$

A la limite $\delta \rightarrow 0$, la somme $\delta \sum_\mu f(E_\mu)$ tend vers une intégrale $\int dE f(E)$, de sorte que

$$\langle \varphi | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar\Gamma}{2\pi} \frac{e^{-iEt/\hbar}}{\frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E^2} dE \quad (25)$$

intégrale qui se calcule par la méthode des résidus et se réduit à

$$\langle \varphi | \psi(t) \rangle = e^{-\Gamma|t|/2} \quad (26)$$

(*) Un tel problème peut être abordé également par la méthode de Weisskopf-Wigner. Voir par exemple Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, complément D_{XIII}.

La probabilité de trouver le système à l'instant t dans le niveau $|\varphi\rangle$ est donc

$$|\langle\varphi|\psi(t)\rangle|^2 = e^{-\Gamma|t|} \quad (27)$$

Elle décroît exponentiellement avec une constante de temps Γ^{-1} .

b) EXCITATION DU NIVEAU DISCRET À PARTIR D'UN AUTRE ÉTAT DU SYSTÈME

Supposons maintenant que le système étudié ait un autre niveau discret $|\chi\rangle$, d'énergie non perturbée E_χ , orthogonal à l'état discret $|\varphi\rangle$ et au quasi-continuum d'états $\{|k\rangle\}$. Ce niveau $|\chi\rangle$ n'est couplé directement qu'à l'état $|\varphi\rangle$ par un hamiltonien de couplage W .

$$\langle\varphi|W|\chi\rangle = w \quad (28.a)$$

$$\langle k|W|\chi\rangle = 0 \quad (28.b)$$

Tous les autres éléments de matrice de W sont supposés nuls.

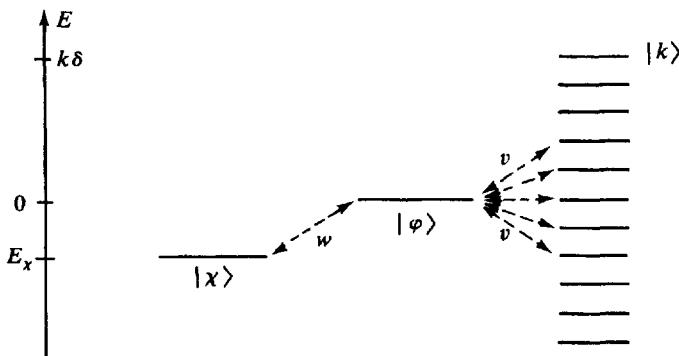


Figure 2. Schéma des niveaux d'énergie (et de leur couplage) envisagés dans ce paragraphe.

Nous allons montrer que, si w est suffisamment petit, il est possible de définir une probabilité par unité de temps pour que le système, initialement dans l'état $|\chi\rangle$, quitte cet état. En d'autres termes, par suite de son couplage avec un niveau discret $|\varphi\rangle$, lui-même couplé à un continuum, le niveau $|\chi\rangle$ acquiert une durée de vie finie.

Nous avons montré plus haut (§ 2) que le couplage de $|\varphi\rangle$ avec les états $|k\rangle$ donne naissance à un nouveau quasi-continuum d'états $|\psi_\mu\rangle$. Calculons alors $\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle$. Puisque W ne couple $|\chi\rangle$ qu'à

$|\varphi\rangle$, nous avons :

$$\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle = \langle\psi_\mu|\varphi\rangle\langle\varphi|W|\chi\rangle = \langle\psi_\mu|\varphi\rangle w \quad (29)$$

Il apparaît ainsi que W couple le niveau $|\chi\rangle$ au quasi-continuum d'états $\{|\psi_\mu\rangle\}$. Si le couplage w reste petit, la probabilité par unité de temps pour que le système quitte l'état $|\chi\rangle$ est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$\Gamma_\chi = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle|^2 \frac{1}{\delta} \quad (30)$$

(La densité d'états $\{|\psi_\mu\rangle\}$, pour $E_\mu = E_\chi$, est égale à $1/\delta$). En utilisant (29) et (17), nous trouvons à la limite $\delta \rightarrow 0$:

$$\Gamma_\chi = w^2 \frac{\Gamma}{\frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\chi^2} \quad (31)$$

Dans le cas particulier où $|\chi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ ont même énergie ($E_\chi = E_\varphi = 0$) l'expression (31) devient

$$\Gamma_\chi = \frac{4w^2}{\hbar^2 \Gamma} \quad (32)$$

Ainsi, un état discret $|\chi\rangle$ couplé à un autre état discret $|\varphi\rangle$ instable se désintègre lui-même irréversiblement, avec un taux Γ_χ donné par (32).

Remarques

(i) Le traitement présenté ci-dessus n'est en fait valable que pour w suffisamment petit. Précisons ce point : il faut que le couplage w soit plus petit que la largeur $\hbar\Gamma$ de l'intervalle sur lequel $|\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle|^2$ est appréciable, c'est-à-dire encore la largeur de l'intervalle du nouveau continuum $\{|\psi_\mu\rangle\}$ dans lequel la probabilité de présence de $|\varphi\rangle$ est importante. Un tel résultat peut également se comprendre à partir d'une comparaison entre la période associée à l'oscillation de Rabi sur la transition $|\chi\rangle \rightarrow |\varphi\rangle$, qui est de l'ordre de \hbar/w , et la durée de vie du système dans le niveau $|\varphi\rangle$, qui est de l'ordre de Γ^{-1} . Si cette durée de vie est plus courte que la période des oscillations de Rabi, un système initialement dans l'état $|\chi\rangle$ évoluera de façon irréversible vers le continuum car, une fois passé dans $|\varphi\rangle$, il se désintégrera aussitôt dans le continuum $\{|\chi\rangle\}$ et aura une probabilité très faible de revenir dans $|\chi\rangle$. Notons pour finir que la condition $w \ll \hbar\Gamma$ entraîne que $\Gamma_\chi \ll \Gamma$. La durée de vie associée au niveau $|\chi\rangle$ est bien plus longue que celle associée au niveau $|\varphi\rangle$.

(ii) Le niveau $|\chi\rangle$ introduit plus haut peut faire lui-même partie du continuum $\{|\chi\rangle\}$ (c'est en particulier le cas pour l'absorption d'un photon entre l'état fondamental a et un état excité discret b d'un atome,

problème que nous aborderons dans le paragraphe B.4 du chapitre II). Pour pouvoir appliquer le traitement précédent, il faut enlever l'état $|\chi\rangle$ au continuum. Il est clair que si δ est suffisamment petit, le nouveau continuum résultant du couplage entre l'état discret $|\varphi\rangle$ et le continuum d'états $\{|k\rangle\}$ auquel on a soustrait $|\chi\rangle$ sera suffisamment voisin du continuum $\{|\psi_\mu\rangle\}$ étudié plus haut, pour que tous les résultats précédents demeurent valables.

c) DIFFUSION RÉSONNANTE VIA L'ÉTAT DISCRET

Considérons maintenant deux niveaux $|\chi_i\rangle$ et $|\chi_j\rangle$ de même énergie E_χ . Par exemple, dans le problème de la diffusion résonnante d'un photon par un atome, $|\chi_i\rangle$ (resp. $|\chi_j\rangle$) sont des états où l'atome est dans l'état fondamental en présence du photon incident (resp. diffusé) (voir § C-3 du chapitre II). Ces deux niveaux $|\chi_i\rangle$ et $|\chi_j\rangle$ sont couplés à $|\varphi\rangle$ par un terme de couplage W ($\langle\varphi|W|\chi_i\rangle = w_i$ et $\langle\varphi|W|\chi_j\rangle = w_j$). En revanche, nous supposons que $|\chi_i\rangle$ et $|\chi_j\rangle$ ne sont couplés ni entre eux ($\langle\chi_i|W|\chi_j\rangle = 0$), ni aux niveaux du quasi-continuum $\{|k\rangle\}$ ($\langle k|W|\chi_i\rangle = 0$). Nous allons étudier la diffusion de $|\chi_i\rangle$ vers $|\chi_j\rangle$ et montrer que, même si $E_\chi = E_\varphi$, l'amplitude de diffusion ne diverge pas. Ce résultat est, bien sûr, lié au fait que le niveau discret $|\varphi\rangle$ est dissous par le couplage V dans le quasi-continuum d'états $\{|\psi_\mu\rangle\}$.

Rappelons tout d'abord pourquoi l'amplitude de diffusion diverge si l'on ne tient pas compte du couplage entre l'état discret $|\varphi\rangle$ et le continuum $\{|k\rangle\}$. A l'ordre le plus bas en V , l'élément de la matrice de transition s'écrit

$$\mathcal{T}_{ji} = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \langle \chi_j | W \frac{1}{E_\chi - H_0 + i\eta} W | \chi_i \rangle \quad (33)$$

c'est-à-dire encore

$$\mathcal{T}_{ji} \simeq \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{\langle \chi_j | W | \varphi \rangle \langle \varphi | W | \chi_i \rangle}{E_\chi - E_\varphi + i\eta} \quad (34)$$

expression qui diverge bien si $E_\chi = E_\varphi$.

Le couplage entre $|\varphi\rangle$ et $|k\rangle$ n'apparaît qu'aux ordres supérieurs en V . En fait, il est possible d'écrire l'élément de matrice de transition à tous les ordres en V . Il suffit de remplacer dans (33) H_0 par $H = H_0 + V$ (voir l'expression (B.15) du chapitre). Comme W ne couple $|\chi_i\rangle$ et $|\chi_j\rangle$ qu'à $|\varphi\rangle$, il vient

$$\mathcal{T}_{ji} = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \langle \chi_j | W | \varphi \rangle \langle \varphi | \frac{1}{E_\chi - H + i\eta} | \varphi \rangle \langle \varphi | W | \chi_i \rangle \quad (35)$$

Introduisons alors la relation de fermeture sur les états propres $|\psi_\mu\rangle$ de H dans l'élément de matrice central de (35). On voit apparaître la densité d'état $|\varphi\rangle$ dans le nouveau continuum et l'expression (35) devient, compte tenu de (17) et (1) :

$$\mathcal{C}_{ji} = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} w_j^* w_i \delta \sum_{\mu} \frac{\hbar\Gamma/2\pi}{(E_\chi - E_\mu + i\eta) \left(E_\mu^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4} + v^2 \right)} \quad (36)$$

A la limite $\delta \rightarrow 0$, cette somme tend vers l'intégrale suivante

$$\mathcal{C}_{ji} = w_j^* w_i \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\hbar\Gamma/2\pi}{(E_\chi - E + i\eta) \left(E^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4} \right)} \quad (37)$$

qui peut être calculée par la méthode des résidus et vaut

$$\mathcal{C}_{ji} = w_j^* w_i \frac{1}{E_\chi + i \frac{\hbar\Gamma}{2}} \quad (38)$$

L'amplitude de diffusion ne diverge donc plus quand $E_\chi = E_\varphi = 0$. Remarquons que tout se passe comme si, dans l'expression d'ordre le plus bas, l'énergie du niveau discret $|\varphi\rangle$ avait été remplacée par une énergie complexe $E_\varphi - i\hbar\Gamma/2 = -i\hbar\Gamma/2$. Tout en restant fini, l'élément de matrice de transition varie donc de manière résonnante quand E_χ est balayé sur un intervalle de largeur $\hbar\Gamma$ autour de $E_\varphi = 0$.

a) PROFILS DE FANO

Nous considérons à nouveau le cas où le système possède un autre état $|\chi\rangle$ couplé à $|\varphi\rangle$ par un terme de couplage W ($\langle\varphi|W|\chi\rangle = w$), mais nous supposons maintenant que $|\chi\rangle$ est également couplé directement aux états $\{|k\rangle\}$ du quasi-continuum par W . Nous faisons également une hypothèse simplificatrice sur les éléments de matrice $\langle k|W|\chi\rangle$ qui sont supposés indépendants de $|k\rangle$ ($\langle k|W|\chi\rangle = w'$). Quelle est la probabilité d'exciter un niveau $|\psi_\mu\rangle$ à partir de $|\chi\rangle$? Cette probabilité est proportionnelle au carré de l'élément de matrice $\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle$ qui peut être calculé à partir de (17) et (5) :

$$\langle\psi_\mu|W|\chi\rangle = \frac{\langle\varphi|W|\chi\rangle v + \sum_k \langle k|W|\chi\rangle v^2 / (E_\mu - E_k)}{\left[v^2 + \frac{\hbar^2\Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (39)$$

expression qui s'écrit, compte tenu de (6) :

$$\langle \psi_\mu | W | \chi \rangle = \frac{w v + w' E_\mu}{\left[v^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} + E_\mu^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (40)$$

Quand on fait varier l'énergie de l'état E_μ , les deux termes de (40) s'ajoutent ou se retranchent suivant le signe respectif de E_μ et de wv/w' . La forme de raie (probabilité d'excitation en fonction de E_μ) est donc en général asymétrique.

La formule (40) est souvent réécrite en fonction des variables réduites

$$\varepsilon_\mu = \frac{E_\mu}{\hbar \Gamma / 2} \quad (41)$$

$$q = \frac{\delta}{\pi v} \frac{w}{w'} \quad (42)$$

La formule (41) revient à prendre $\hbar \Gamma / 2$ comme unité d'énergie. Le paramètre q défini en (42) caractérise le rapport entre les forces de couplage vers l'état discret $|\varphi\rangle$ et vers le quasi-continuum $\{ |k\rangle \}$. Introduisons également le paramètre ξ

$$\xi = \frac{4 v^2}{\hbar^2 \Gamma^2} = \frac{2}{\pi} \frac{\delta}{\hbar \Gamma} \quad (43)$$

ξ^{-1} représente le nombre de niveaux du continuum discrétisé dans la largeur naturelle ($\xi \rightarrow 0$ quand $\delta \rightarrow 0$). En utilisant ces définitions, nous obtenons à partir de (40) :

$$\frac{|\langle \psi_\mu | W | \chi \rangle|^2}{w'^2} = \frac{|q + \varepsilon_\mu|^2}{1 + \varepsilon_\mu^2 + \xi} \quad (44)$$

Nous avons représenté sur la figure 3 plusieurs profils d'excitation possibles, appelés profils de Fano (*), obtenus pour diverses valeurs de q . Notons que la situation $q \gg 1$ (cas où le couplage entre $|\chi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ est beaucoup plus grand que le couplage entre $|\chi\rangle$ et $|k\rangle$) correspond à la situation envisagée dans le paragraphe 3-b de ce complément.

Remarque

Dans toutes les situations considérées précédemment, le passage à la limite $\delta \rightarrow 0$ n'a jamais posé de problèmes, les valeurs limites des quantités considérées étant obtenues sans ambiguïté. Il n'en est pas toujours ainsi et

(*) De tels profils se rencontrent dans de nombreuses situations physiques, par exemple dans la photoionisation au voisinage d'un état autoionisant.

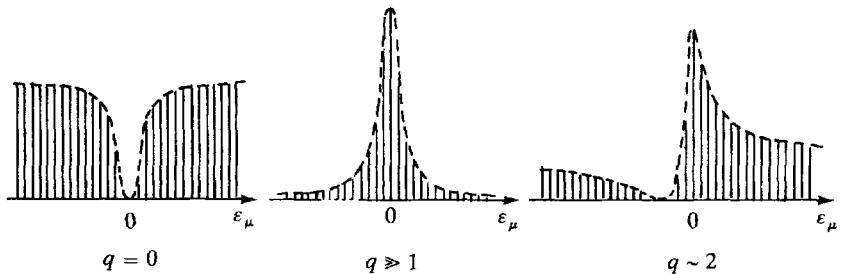


Figure 3. Profils de Fano obtenus pour diverses valeurs de q . L'intensité des transitions vers les états $|\psi_\mu\rangle$ du quasi-continuum est représentée par des traits pleins. Le trait pointillé correspondant à l'enveloppe de ces intensités permet de visualiser le profil d'excitation à la limite continue ($\delta \rightarrow 0$). Notons qu'à l'exception des situations limites $q = 0$ et $q \gg 1$, les profils sont asymétriques.

certaines précautions sont nécessaires quand le problème étudié (*) fait intervenir des quantités telles que $\langle k | \psi_\mu \rangle$ (formule (8.b)) où apparaît le facteur $1/(E_\mu - E_k)$. En fait, dans le cas discret, $(E_\mu - E_k)$ ne s'annule jamais (voir figure 1), de sorte que la division par $(E_\mu - E_k)$ ne présente pas de difficultés. C'est ce que nous avons fait par exemple pour déduire (5) de (4.a). En revanche, il faut prendre plus de précautions pour déterminer la limite continue, au sens des distributions, de $1/(E_\mu - E_k)$. Pour déterminer une telle limite, réexprimons $(E_\mu - E_k)^{-1}$ en fonction de l'angle φ_μ introduit dans l'équation (13.a) et de l'entier m le plus proche de E_μ/δ (voir figure 1). En utilisant l'équation (13.b) et le fait que $E_k = k\delta$, on obtient

$$\frac{1}{E_\mu - E_k} = \frac{1}{\left(m - k + \frac{\varphi_\mu}{\pi}\right)\delta} \quad (45)$$

Réécrivons alors (45) comme la somme d'une fonction impaire de $(m - k)$ et d'une fonction paire.

$$\frac{1}{E_\mu - E_k} = \frac{(m - k)\delta}{(m - k)^2\delta^2 - \left(\frac{\varphi_\mu}{\pi}\delta\right)^2} - \frac{\varphi_\mu\delta/\pi}{(m - k)^2\delta^2 - \left(\frac{\varphi_\mu\delta}{\pi}\right)^2} \quad (46)$$

Comme φ_μ/π est, en module, inférieur à $\frac{1}{2}$, $\varphi_\mu\delta/\pi$ tend vers zéro quand δ tend vers zéro. Le premier terme du membre de droite de (46), impair en $(m - k)\delta$, tend donc à la limite $\delta \rightarrow 0$ vers la partie principale $\mathcal{P}(1/(E' - E))$, où E' et E sont associés respectivement à E_μ et E_k . Analysons maintenant le second terme. Celui-ci ne prend des valeurs

(*) C'est en particulier le cas lorsqu'on étudie la répartition en énergie des états finals de la désintégration de l'état discret.

notables que pour m voisin de k . En particulier, pour $E_m = E_k$, sa valeur est égale à $\pi/(\varphi_\mu \delta)$ et tend donc vers l'infini à la limite $\delta \rightarrow 0$. En dehors de ce point, ce terme change de signe mais sa valeur reste de l'ordre de $1/\delta$ pour $(m - k)$ petit. Sa largeur en E_k est de l'ordre de δ . Le second terme de (46) tend donc vers une distribution localisée en $E_m = E_k$ quand $\delta \rightarrow 0$. Calculons maintenant la somme

$$-\delta \sum_k \frac{\varphi_\mu \delta / \pi}{(m - k)^2 \delta^2 - \left(\frac{\varphi_\mu \delta}{\pi}\right)^2} = \sum_p \frac{\varphi_\mu / \pi}{\left(\frac{\varphi_\mu}{\pi}\right)^2 - p^2} \quad (47)$$

La somme de cette série est connue (*). Elle vaut $\pi \cot \varphi_\mu$, c'est-à-dire encore d'après (13.a) :

$$\frac{2\pi}{\hbar\Gamma} E_\mu \quad (48)$$

Nous en déduisons que la limite $\delta \rightarrow 0$ du second terme de (46) est $(2\pi/\hbar\Gamma) E \delta(E - E')$. En définitive, nous avons ainsi trouvé :

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{E_\mu - E_k} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{E' - E} \right) + \frac{2\pi}{\hbar\Gamma} E \delta(E - E') \quad (49)$$

4. Généralisation à des continuums plus réalistes. Diagonalisation de l'hamiltonien sans discréétisation

Nous revenons dans ce dernier paragraphe au problème d'un état discret $|\varphi\rangle$ couplé à un continuum d'états $\{|E\rangle\}$, pour étudier directement (sans discréétiser le continuum) les états propres $|\psi(E)\rangle$ de l'hamiltonien total. Contrairement à la situation des paragraphes 2 et 3, nous ne faisons plus d'hypothèses restrictives sur le continuum et sur son couplage avec l'état $|\varphi\rangle$. En particulier, l'élément de matrice $\langle E | V | \varphi \rangle = v(E)$ est maintenant une fonction quelconque de E . La relation d'orthonormalisation entre états du continuum est :

$$\langle E' | E \rangle = \delta(E - E') \quad (50)$$

et les éléments de matrice de l'hamiltonien H_0 et du couplage V sont :

$$\langle \varphi | H_0 | \varphi \rangle = E_\varphi \quad (51.a)$$

$$\langle E | H_0 | E' \rangle = E \delta(E - E') \quad (51.b)$$

$$\langle E | V | \varphi \rangle = v(E) \quad (51.c)$$

$$\langle E' | V | E \rangle = \langle \varphi | V | \varphi \rangle = 0 \quad (51.d)$$

Soit $|\psi(E')\rangle$ un état propre de H de valeur propre E'

$$H |\psi(E')\rangle = E' |\psi(E')\rangle \quad (52)$$

(*) Voir par exemple Cartan, corrigé de l'exercice 25, p. 226.

Pour trouver la décomposition de $|\psi(E')\rangle$ sur les états non perturbés $|\varphi\rangle$ et $|E\rangle$, nous procérons comme au paragraphe 2-a et projetons (52) d'abord sur $|\varphi\rangle$, puis sur $|E\rangle$. Nous obtenons ainsi les équations :

$$E_\varphi \langle \varphi | \psi(E') \rangle + \int dE v(E)^* \langle E | \psi(E') \rangle = E' \langle \varphi | \psi(E') \rangle \quad (53.a)$$

$$E \langle E | \psi(E') \rangle + v(E) \langle \varphi | \psi(E') \rangle = E' \langle E | \psi(E') \rangle \quad (53.b)$$

L'équation (53.b) se transforme en :

$$(E' - E) \langle E | \psi(E') \rangle = v(E) \langle \varphi | \psi(E') \rangle \quad (54)$$

La théorie des distributions permet d'écrire la solution générale de (54) sous la forme :

$$\langle E | \psi(E') \rangle = \left[\mathcal{P} \frac{1}{E' - E} + z(E') \delta(E - E') \right] v(E) \langle \varphi | \psi(E') \rangle \quad (55)$$

où $z(E')$ est une fonction quelconque de E' . Pour déterminer cette fonction $z(E')$, reportons (55) dans (53.a). Il vient :

$$E_\varphi + \mathcal{P} \int dE \frac{|v(E)|^2}{E' - E} + z(E') |v(E')|^2 = E' \quad (56)$$

c'est-à-dire encore

$$E_\varphi + \hbar \Delta(E') + \frac{1}{\pi} \hbar \frac{\Gamma(E')}{2} z(E') = E' \quad (57)$$

avec

$$\Gamma(E') = \frac{2\pi}{\hbar} |v(E')|^2 \quad (58.a)$$

$$\Delta(E') = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \int dE \frac{|v(E)|^2}{E' - E} = \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int dE \frac{\Gamma(E)}{E' - E} \quad (58.b)$$

Nous en déduisons

$$z(E') = 2\pi \frac{E' - E_\varphi - \hbar \Delta(E')}{\hbar \Gamma(E')} \quad (59)$$

La donnée de (55) et (59) permet de trouver les nouveaux vecteurs propres à un coefficient de normalisation près, qui est déterminé par l'équation

$$\langle \psi(E') | \psi(E) \rangle = \delta(E' - E) \quad (60)$$

Nous ne détaillerons pas ici le calcul de ce coefficient de normalisation,

et donnons simplement le résultat (*):

$$\begin{aligned} |\psi(E')\rangle &= \frac{1}{\{[E' - E_\varphi - \hbar\Delta(E')]^2 + [\hbar\Gamma(E')/2]^2\}^{1/2}} \times \\ &\times \left\{ v(E') \left[|\varphi\rangle + \mathcal{P} \int dE \frac{v(E)}{E' - E} |E\rangle \right] + [E' - E_\varphi - \hbar\Delta(E')] |E'\rangle \right\} \end{aligned} \quad (61)$$

Aucune hypothèse restrictive n'ayant été faite sur la variation du couplage $v(E)$ avec E , les vecteurs d'état ainsi obtenus peuvent être appliqués à l'étude de nombreux problèmes.

(*) Voir U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).

CHAPITRE II

Description qualitative de quelques processus d'interaction entre atomes et photons

Ce chapitre II présente une vue d'ensemble sur les interactions entre atomes et photons. Le but visé est d'introduire simplement un certain nombre de processus fondamentaux, de préciser le vocabulaire qui est utilisé pour les décrire et d'analyser les phénomènes physiques qui leur sont associés. L'accent sera mis plus sur le contenu physique des processus étudiés que sur les méthodes de calcul. Nous n'utiliserons au cours de la discussion que les notions simples sur les amplitudes de transition introduites au chapitre I, réservant à des chapitres ultérieurs la présentation de méthodes de calcul plus puissantes et plus précises.

Pour classer les différents processus étudiés, il nous a semblé commode de considérer le nombre de photons qui sont impliqués dans un processus donné (à l'ordre le plus bas où ce dernier apparaît).

Ainsi, les processus les plus simples sont ceux au cours desquels un photon nouveau apparaît (processus d'*émission* étudiés dans la partie A), ou au cours desquels un photon initialement présent disparaît (processus d'*absorption* étudiés dans la partie B). Plusieurs cas sont distingués suivant la nature discrète ou continue des états atomiques internes initial et final, ce qui permet de passer en revue plusieurs phénomènes importants comme la photoionisation, le rayonnement de freinage, la photodissociation... Nous montrons également dans la partie B comment la dynamique du processus d'*absorption* (ou d'*émission* stimulée) peut être sensible à l'état du champ incident. Cette discussion est prolongée dans le complément A_{II} où la probabilité d'*absorption* totale est reliée à des fonctions de corrélation des deux systèmes en interaction, l'atome et le champ.

Nous abordons ensuite, dans la partie C, l'étude d'un processus plus complexe impliquant plusieurs photons, le processus de *diffusion* au

cours duquel un photon disparaît et un photon nouveau apparaît. Plusieurs types de diffusion sont distingués suivant que le photon a une énergie petite ou grande devant les énergies d'excitation de l'atome, le cas de la diffusion résonnante faisant l'objet d'un traitement spécial.

La partie suivante D est consacrée à une description des *processus multiphotoniques* au cours desquels plusieurs photons apparaissent ou disparaissent. La variété de ces processus est très grande, et nous nous bornons à passer en revue quelques exemples significatifs.

Enfin, dans les deux dernières parties E et F, nous étudions des processus pour lesquels l'état du champ est le même dans l'état initial et dans l'état final, mais au cours desquels des photons peuvent être émis et réabsorbés, ou absorbés et réémis. Nous étudions ainsi dans la partie E les *corrections radiatives* spontanées (ou stimulées) résultant de l'émission et de la réabsorption (ou de l'absorption et de la réémission) d'un photon par une particule chargée ou un atome. Le cas où les photons sont émis par une particule (ou un atome) et réabsorbés par une autre particule (ou un autre atome) est analysé dans la partie F. De tels échanges de photons entre particules ou atomes donnent naissance à des interactions effectives dont deux exemples sont donnés (interactions magnétiques et interactions de Van der Waals). Mentionnons pour terminer que le problème des corrections radiatives est abordé dans le complément B_{II} à partir d'un autre point de vue (point de vue de Pauli-Fierz), consistant à effectuer sur l'hamiltonien de l'électrodynamique quantique une transformation unitaire qui vise à soustraire du champ total le champ transverse « lié » aux particules.

A – PROCESSUS D'ÉMISSION : UN PHOTON NOUVEAU APPARAÎT

L'émission d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{k} et de polarisation ϵ est un processus où le nombre de photons dans le mode $\mathbf{k}\epsilon$ augmente d'une unité, passant de n dans l'état initial à $n + 1$ dans l'état final, tous les autres modes restant dans le même état. Nous supposerons dans ce paragraphe que, dans l'état initial, tous les modes sont vides. L'émission est appelée alors *émission spontanée*. Nous reviendrons ultérieurement sur le cas où des photons sont présents dans l'état initial. Plusieurs cas seront distingués suivant que les états atomiques (internes) initial ou final sont discrets ou continus.

1. Emission spontanée entre deux niveaux atomiques discrets. Désintégration radiative d'un niveau atomique excité

a) PRÉSENTATION DIAGRAMMATIQUE

Considérons tout d'abord l'émission spontanée d'un photon par un atome passant d'un état interne discret $|b\rangle$ à un autre état interne discret $|a\rangle$. Plus précisément, nous prenons, pour état initial du système global, l'état

$$|\varphi_i\rangle = |b, \mathbf{K}; 0\rangle \quad (\text{A.1})$$

qui représente un atome dans l'état interne b , avec une impulsion globale $\hbar\mathbf{K}$, dans le vide de photons, et pour état final

$$|\varphi_f\rangle = |a, \mathbf{K}'; \mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (\text{A.2})$$

qui représente l'atome dans l'état interne a , avec l'impulsion globale $\hbar\mathbf{K}'$, en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$. La représentation diagrammatique d'un tel processus (voir chapitre I, § C-5) est donnée sur la figure 1 :

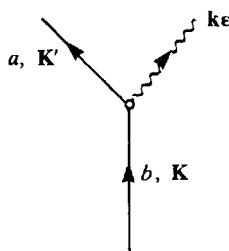


Figure 1. Représentation diagrammatique du processus d'émission spontanée entre deux états discrets b et a .

La conservation de l'énergie, liée à la fonction $\delta^{(T)}(E_f - E_i)$ apparaissant dans l'amplitude de transition (formule (29) du complément A_I), entraîne que :

$$E_b + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} = E_a + \frac{\hbar^2 K'^2}{2M} + \hbar\omega \quad (\text{A.3})$$

De même, la conservation de l'impulsion globale, liée à l'invariance par translation de l'hamiltonien d'interaction (*), conduit à :

$$\hbar\mathbf{K} = \hbar\mathbf{K}' + \hbar\mathbf{k} \quad (\text{A.4})$$

L'état interne b a nécessairement une énergie supérieure à celle de l'état a . Ceci est évident sur (A.3) lorsqu'on se place dans le système du centre de masse ($\mathbf{K} = \mathbf{0}$), mais n'apparaît pas clairement sur le diagramme de la figure 1 qui ne visualise pas les énergies internes. C'est pourquoi on utilise parfois un autre type de représentation diagrammatique (Fig. 2) où les états internes sont représentés par des traits horizontaux dont l'ordonnée repère l'énergie interne, l'émission d'un photon étant schématisée par une flèche ondulée dirigée de b vers a (l'atome « tombe » de b en a en émettant un photon).

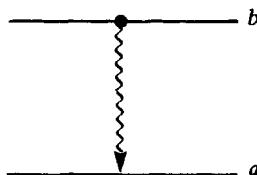


Figure 2. Autre représentation diagrammatique du processus d'émission spontanée entre deux états discrets b et a .

b) PROBABILITÉ D'ÉMISSION SPONTANÉE PAR UNITÉ DE TEMPS

Comme l'impulsion globale est conservée, le problème de l'émission spontanée peut être étudié séparément dans chaque sous-espace correspondant à une valeur donnée de cette impulsion globale, par exemple dans le système du centre de masse où $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ et où, par suite de (A.4), $\mathbf{K}' = -\mathbf{k}$. Dans ce sous espace, $|\varphi_i\rangle = |b, \mathbf{0}; 0\rangle$ est un état discret, puisque $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ est fixé et que l'état interne b est par hypothèse discret, de même que le vide $|0\rangle$ du rayonnement. Par contre, il existe une infinité d'états finals $|\varphi_f\rangle = |a, -\mathbf{k}; \mathbf{k}\epsilon\rangle$, correspondant à toutes

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », § III-D-3.

les valeurs possibles de \mathbf{k} , dont les énergies $E_a + \hbar\omega + (\hbar^2 k^2 / 2M)$ varient de manière continue. Ces états sont couplés à $|\varphi_i\rangle$ par H_{II} . Le problème de l'émission spontanée entre deux états atomiques discrets est donc finalement, en ce qui concerne le système *global* « atome + rayonnement », le problème d'un état discret couplé à un continuum.

L'évolution du système va donc présenter un caractère irréversible. Il n'y aura pas d'oscillations réversibles entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$, mais départ irréversible de l'état discret $|\varphi_i\rangle$ vers le continuum $|\varphi_f\rangle$ avec une probabilité de transition par unité de temps Γ donnée, d'après l'expression (B.8) du chapitre I, par (*):

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\epsilon} |\langle a, -\mathbf{k}; \mathbf{k}\epsilon | H_{II} | b, \mathbf{0}; 0 \rangle|^2 \rho(E_f = E_i) \quad (\text{A.5})$$

Par ailleurs, la relation de conservation de l'énergie (A.3), jointe à (A.4), permet de déterminer les états finals qui sont atteints, c'est-à-dire encore les fréquences émises. Dans le système du centre de masse ($\mathbf{K} = \mathbf{0}$, $\mathbf{K}' = -\mathbf{k}$), on obtient ainsi :

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 - E_{rec} \quad (\text{A.6})$$

où

$$\hbar\omega_0 = E_b - E_a \quad (\text{A.7})$$

est l'énergie de la transition atomique $b \rightarrow a$ et où :

$$E_{rec} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2Mc^2} \quad (\text{A.8})$$

est l'énergie cinétique de recul de l'atome lors de l'émission du photon. Comme $\hbar\omega \ll Mc^2$, cette énergie de recul est très petite devant $\hbar\omega$ dans le domaine optique (et a fortiori micro-onde), et est souvent négligée. Ceci revient à considérer $M = \infty$, donc un atome infinitement lourd. La fréquence ω des photons émis spontanément dans le système du centre de masse est donc égale (à E_{rec}/\hbar près) à la fréquence ω_0 de la transition atomique.

Remarques

(i) Si l'on choisit un référentiel autre que le système du centre de masse ($\mathbf{K} \neq \mathbf{0}$), dans lequel l'atome se déplace à la vitesse $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{K}/M$, la résolution simultanée de (A.3) et (A.4) donne :

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 - E_{rec} + \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \quad (\text{A.9})$$

(*). L'exercice 1 présente un calcul de Γ pour un atome à deux niveaux.

Pour chaque direction \mathbf{k} d'émission, il y a donc une fréquence d'émission bien définie, dépendant de la vitesse \mathbf{v} de l'atome et de l'angle entre \mathbf{v} et \mathbf{k} (effet Doppler).

(ii) Dans tout ce qui précède, nous avons implicitement supposé que le mouvement du centre de masse de l'atome est libre. Quand l'atome évolue dans un potentiel extérieur, l'impulsion globale n'est plus une constante du mouvement (l'équation (A.4) n'est plus valable). Par ailleurs, l'expression (A.3) devient

$$E_b + E_{c.m.}^{(i)} = E_a + E_{c.m.}^{(f)} + \hbar\omega \quad (\text{A.3}')$$

où $E_{c.m.}^{(i)}$ et $E_{c.m.}^{(f)}$ sont respectivement les énergies initiale (avant le processus d'émission) et finale (après ce processus) associées au mouvement du centre de masse dans le potentiel extérieur. Dans certaines circonstances, la probabilité pour que cette énergie ne change pas ($E_{c.m.}^{(i)} = E_{c.m.}^{(f)}$) peut être notable. Il y a alors émission d'un photon dont la fréquence n'est déplacée ni par effet de recul, ni par effet Doppler. Cette situation correspond aux effets Dicke et Mössbauer et est étudiée plus en détail dans l'exercice 2. L'analyse faite sur le processus d'émission peut être généralisée sans difficulté au processus d'absorption considéré dans la partie B. Il est possible que la fréquence d'un photon absorbé corresponde exactement à la fréquence atomique quand l'atome est placé dans un potentiel extérieur.

c) RÉSULTATS NON PERTURBATIFS

Toutes les considérations précédentes résultent d'un calcul de l'amplitude de transition à l'ordre le plus bas. Comme nous l'avons déjà indiqué dans le chapitre I (§ B-2), il est possible d'aller plus loin et d'obtenir pour les amplitudes $\langle \varphi_i | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle$ et $\langle \varphi_f | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle$ des expressions contenant des termes à tous les ordres en H_{I1} (voir également le complément C₁ ou le chapitre III, § C-1). Les résultats d'un tel traitement non perturbatif sont alors les suivants :

(i) La probabilité de présence de l'atome dans l'état supérieur b , $P_b(T)$, décroît exponentiellement avec une constante de temps :

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad (\text{A.10})$$

où Γ est donnée en (A.5) (*), et qui est appelée la *durée de vie radiative* de l'état b . L'émission spontanée est donc responsable d'une désintégration radiative des niveaux atomiques excités.

(ii) Par suite de sa durée de vie finie τ , l'état excité b a une certaine dispersion en énergie, caractérisée par $\hbar/\tau = \hbar\Gamma$. Γ est appelée la

(*) Nous supposons que le seul niveau d'énergie inférieure à E_b vers lequel l'atome puisse tomber à partir de b en émettant spontanément un photon est le niveau a .

largeur naturelle du niveau b (en unités de pulsation). Les raies d'émission spontanée ne sont donc pas infiniment fines, comme le prévoit la théorie à l'ordre 1, mais ont une certaine largeur (égale à la somme des largeurs naturelles des deux niveaux de la transition).

(iii) On trouve enfin que l'état b est déplacé en énergie. Il s'agit là d'une correction radiative sur laquelle nous reviendrons plus loin (dans le paragraphe E-1-b).

Remarque

Le processus d'émission spontanée à partir d'un niveau atomique excité discret peut être profondément modifié si, au lieu d'être dans l'espace libre, l'atome est enfermé dans une cavité (*). Les modes du champ électromagnétique dans la cavité forment alors un ensemble discret (si l'amortissement de la cavité est négligeable). Supposons tout d'abord que l'une des fréquences propres de la cavité coïncide avec la fréquence atomique ω_0 , toutes les autres fréquences propres étant suffisamment éloignées de ω_0 pour que nous puissions ignorer le couplage non résonnant de l'atome avec ces autres modes (il faut pour cela que la cavité soit assez petite). Ignorons également les nombres quantiques externes (énergie de recul négligeable). Les deux états $|\varphi_i\rangle = |b;0\rangle$, atome dans l'état b , mode résonnant dans l'état $|0\rangle$, et $|\varphi_f\rangle = |a;1\rangle$, atome dans l'état a avec un photon dans le mode résonnant, forment alors deux états discrets du système global, dégénérés en énergie et éloignés de tous les autres états. L'interaction entre l'atome et le rayonnement doit alors donner naissance à une oscillation de Rabi : l'atome émet un photon dans la cavité, puis le réabsorbe, puis le réemet et ainsi de suite...

Dans le cas où aucune des fréquences propres de la cavité ne coïncide avec ω_0 , l'évolution du système est complètement différente : l'atome ne peut pas émettre de photon dans la cavité, car l'énergie totale ne serait pas conservée.

2. Emission spontanée entre un état du continuum et un état discret

Nous supposons maintenant que l'un des deux états atomiques, a ou b , appartient à un continuum, l'autre étant discret.

(*) Voir par exemple D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. **47**, 233 (1981) ; S. Haroche et J.M. Raimond, in « Advances in Atomic and Molecular Physics », Vol. **20** (D.R. Bates and B. Bederson eds) Academic Press (New York, 1985) p. 347 ; P. Filipowicz, P. Meystre, G. Rempe and H. Walther, Optica Acta, **32**, 1105 (1985).

a) PREMIER EXEMPLE : CAPTURE RADIATIVE

Dans le premier exemple que nous étudierons, l'état atomique b appartient au continuum d'ionisation de l'atome (*). Ce continuum est représenté en traits hachurés sur la figure 3 (la distance E_I entre le début du continuum et l'état fondamental est l'énergie d'ionisation). L'émission spontanée fait passer l'atome d'un état b de ce continuum vers un état discret a situé au dessous de la limite d'ionisation :

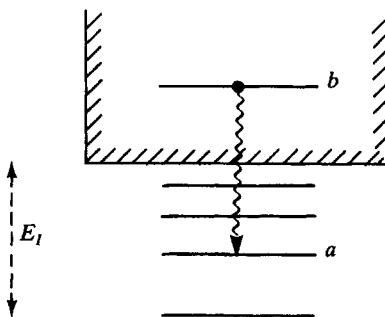


Figure 3. Emission spontanée à partir d'un état b du continuum d'ionisation vers un état atomique discret a .

Physiquement, un état tel que b décrit un état stationnaire de collision entre un électron et un ion. L'électron n'est pas lié à l'ion dans l'état b . En superposant linéairement des états tels que b , on peut construire des paquets d'ondes décrivant un électron arrivant de l'infini, interagissant avec l'ion, et s'éloignant de nouveau à l'infini. Si un processus d'émission spontanée du type de celui représenté sur la figure 3 se produit, l'électron perd de l'énergie de manière radiative et se retrouve lié à l'ion dans un état a , pour former un atome neutre. On dit alors qu'il y a capture radiative de l'électron par l'ion. Des processus de capture radiative d'électrons par des protons se produisent dans l'espace interstellaire et sont à l'origine de la formation d'atomes d'hydrogène dans des états de Rydberg n , que l'on détecte en radioastronomie par les rayonnements micro-ondes que ces atomes émettent ensuite dans des transitions $n \rightarrow n - 1$, $n - 1 \rightarrow n - 2 \dots$

Comme les états $|\varphi_i\rangle = |b;0\rangle$ et $|\varphi_f\rangle = |a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ appartiennent tous deux à des continuums (le premier à cause de b , le second à cause de

(*) L'atome est supposé infiniment lourd, de sorte que les nombres quantiques externes sont ignorés.

$k\epsilon$), il est possible de définir une probabilité de transition par unité de temps et un flux incident, et par suite une section efficace de capture radiative de l'électron dans l'état a . De telles sections efficaces jouent un rôle important en Astrophysique et en Physique des Plasmas.

b) DEUXIÈME EXEMPLE : DISSOCIATION RADIATIVE D'UNE MOLÉCULE

Nous considérons maintenant un second exemple, emprunté à la Physique Moléculaire, où c'est l'état supérieur b qui est discret, et l'état inférieur a qui appartient à un continuum.

L'état b est supposé appartenir à un état électronique excité d'une molécule diatomique, dans lequel le potentiel d'interaction effective $V(r)$ entre les deux atomes présente un minimum en fonction de la distance internucléaire r (Fig. 4). L'état b est un état de vibration-rotation dans ce puits de potentiel.

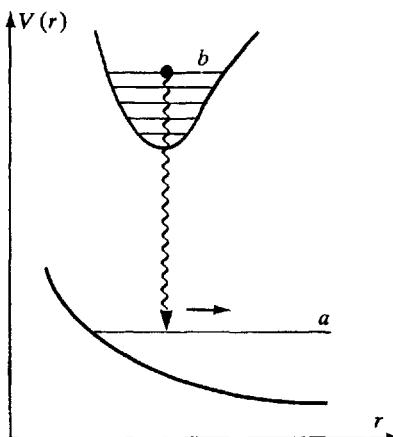


Figure 4. Potentiels d'interaction et niveaux d'énergie d'une molécule diatomique. La figure correspond à un excimère ou à un exciplexe, l'état électronique fondamental étant dissociatif. On considère un niveau électronique excité où les deux atomes sont liés.

L'état a appartient par contre à un état électronique dissociatif, c'est-à-dire à un état pour lequel le potentiel $V(r)$ entre les deux atomes ne présente pas de minimum. Dans un tel état électronique, les deux atomes ne peuvent pas former une molécule stable, et l'état a décrit en fait un état stationnaire de collision entre les deux atomes. Les molécules présentant des configurations du type de celles de la figure 4 sont appelées des excimères, pour des molécules homonucléaires (comme Xe_2), ou exciplexes, pour des molécules hétéronucléaires (comme XeF).

Dans un état tel que b , les deux atomes vibrent autour de leur position d'équilibre. L'émission spontanée d'un photon $\hbar\omega$ fait passer la molécule dans l'état a situé à $\hbar\omega$ au dessous de b , les deux atomes s'éloignant alors rapidement l'un de l'autre. L'émission spontanée a donc dissocié la molécule, d'où le nom de dissociation radiative donné à un tel processus. Comme l'état a appartient à un continuum, la fréquence du photon émis peut varier dans un certain intervalle et le spectre de la lumière émise est un spectre continu et non un spectre de raies discrètes.

Remarque

De tels systèmes se prêtent bien à la réalisation de sources lasers (*). Comme l'état inférieur a se dissocie très vite, avec des temps caractéristiques (de l'ordre des dimensions moléculaires divisées par la vitesse de séparation des deux atomes) beaucoup plus courts que la durée de vie radiative de l'état supérieur b , l'état a peut être beaucoup moins peuplé que l'état b en régime stationnaire (dans une décharge par exemple où l'état b est peuplé en permanence par des collisions). Il est donc possible de réaliser des inversions de population appréciables entre b et a conduisant à un gain important.

3. Emission spontanée entre deux états du continuum d'ionisation - Rayonnement de freinage

Nous considérons enfin, dans ce dernier paragraphe, le cas où les deux états a et b appartiennent tous deux à un continuum. Par exemple, a et b peuvent être tous deux situés dans le continuum d'ionisation d'un atome (Fig. 5) :

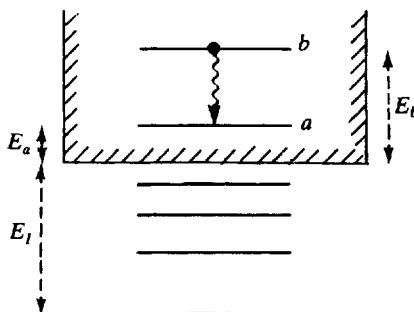


Figure 5. Emission spontanée entre deux états du continuum d'ionisation d'un atome

(*) Voir par exemple Special Issue on Eximer Lasers : IEEE J. of Quant. Electr. QE 15, 265 (1979) ; Excimer Lasers (édité par C.K. Rhodes), Collection « Topics in Applied Physics », Vol. 30, Springer Verlag (Berlin 1979) ; M.H.R. Hutchinson, Appl. Phys. 21, 95 (1980).

Physiquement, un électron arrive de l'infini vers un ion avec une énergie cinétique initiale E_b . Arrivé au voisinage de l'ion, il émet spontanément un photon, ce qui lui fait perdre l'énergie $\hbar\omega$. Mais cette perte d'énergie est insuffisante pour permettre sa capture par l'ion, et l'électron s'éloigne de nouveau vers l'infini avec une énergie cinétique finale $E_a = E_b - \hbar\omega$ inférieure à E_b . L'émission spontanée d'un photon a donc freiné l'électron, d'où le nom de rayonnement de freinage, ou encore « Bremsstrahlung », donné à ce processus. Comme l'énergie E_a de l'état final a peut varier de manière continue, le spectre du rayonnement de freinage est continu.

Insistons sur l'importance de la présence de l'ion. En effet, il est impossible d'avoir une émission réelle d'un photon par un électron libre (*). Pour le voir, il suffit de se placer dans le référentiel au repos de l'électron. L'émission d'un photon, avec recul de l'électron pour conserver l'impulsion globale, conduit alors nécessairement à un état dont l'énergie est supérieure à celle de l'état initial. Il n'y a donc pas d'état final du système global, couplé par H_{I1} à l'état initial, et ayant même énergie. Il faut un troisième partenaire, ici l'ion, qui puisse fournir l'impulsion nécessaire pour atteindre un état final du système global ayant la même énergie que l'état initial (**).

(*) Par contre, un électron libre peut émettre virtuellement un photon et le réabsorber (voir § E-1-a plus loin).

(**) L'exercice 8 présente un calcul de section efficace d'émission de photon par rayonnement de freinage. Ce calcul est perturbatif vis-à-vis du potentiel créé par l'ion et utilise le point de vue de Pauli-Fierz introduit dans le complément B_{II} .

B - PROCESSUS D'ABSORPTION : UN PHOTON DISPARAÎT

Au cours d'un processus d'absorption, un photon disparaît. L'énergie correspondante est gagnée par l'atome sous forme d'énergie cinétique de recul et d'augmentation de l'énergie interne. Comme pour le processus d'émission spontanée, on peut distinguer plusieurs cas suivant le caractère discret ou continu de l'énergie interne atomique dans l'état initial et l'état final. Un certain nombre d'exemples de ces diverses situations sont rapidement passés en revue dans les paragraphes 1, 2, 3.

Un élément nouveau apparaît dans l'étude des processus d'absorption. Plusieurs types d'états initiaux peuvent être envisagés pour le champ (rayonnement incident monochromatique ou à large bande, rayonnement faible ou intense, d'intensité constante ou en impulsion...), alors que dans l'étude de l'émission spontanée, l'état initial du champ est toujours le vide. Nous montrons dans le paragraphe 4, à partir d'arguments qualitatifs, comment la dynamique du processus d'absorption entre deux états discrets peut être sensible aux propriétés du rayonnement incident.

Notons enfin qu'il existe un processus d'émission, *l'émission induite*, qui présente beaucoup d'analogies avec le processus d'absorption. Comme l'absorption, l'émission induite est provoquée par les photons présents dans l'état initial. Par contre, l'atome effectue une transition vers un niveau inférieur, l'énergie perdue par l'atome étant gagnée par le champ qui a induit cette transition. Au lieu d'être atténué, le rayonnement incident est donc amplifié. La plupart des résultats que nous établissons dans ce paragraphe pour l'absorption peuvent être ainsi adaptés à l'émission induite.

1. Absorption entre deux états discrets

Il s'agit là d'un processus tout à fait symétrique du processus d'émission étudié dans le paragraphe A-1 ci-dessus. L'atome passe d'un état interne discret a à un autre état interne discret b , situé plus haut en énergie, par absorption d'un photon $\hbar\omega$. Deux représentations diagrammatiques possibles d'un tel processus sont données sur la figure 6 .

La conservation de l'énergie et de l'impulsion globales à l'issue du processus d'absorption entraîne que la fréquence ω du photon absorbé par un atome initialement immobile ($\mathbf{K} = \mathbf{0}$ dans l'état a) est donnée par :

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 + E_{rec} \quad (\text{B.1})$$

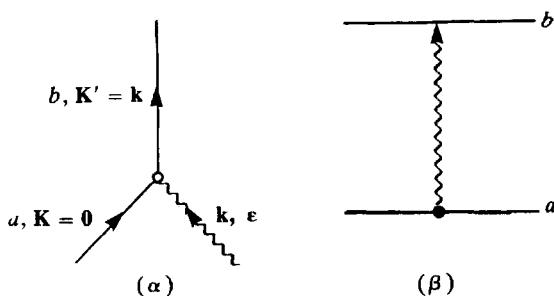


Figure 6. Deux représentations diagrammatiques du processus d'absorption (comparer les figures 1 et 6.α, 2 et 6.β).

Ainsi, pour un atome *initiallement immobile*, les fréquences d'émission et d'absorption diffèrent respectivement de la fréquence atomique ω_0 par les quantités $-E_{rec}/\hbar$ et $+E_{rec}/\hbar$ (comparer A.6 et B.1).

Nous reviendrons plus loin (§ 4) sur les conditions dans lesquelles il est possible de définir une probabilité d'absorption (ou d'émission induite) par unité de temps.

2. Absorption entre un état discret et un état du continuum

a) PREMIER EXEMPLE : PHOTOIONISATION

Il s'agit du processus inverse de la capture radiative. Un atome, initialement dans un état interne discret a , par exemple l'état fondamental, absorbe un photon dont l'énergie $\hbar\omega$ est supérieure à l'énergie d'ionisation E_I de l'atome, et aboutit dans l'état b du continuum d'ionisation (Fig. 7) :

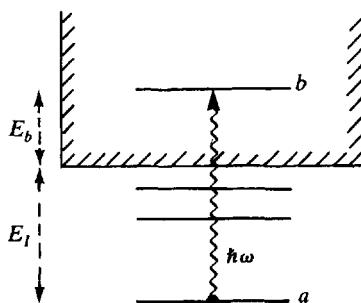


Figure 7. Photoionisation d'un atome par absorption d'un photon ($\hbar\omega > E_I$).

Cette disparition d'un photon, accompagnée de l'apparition d'un photoélectron, n'est autre que l'effet photoélectrique bien connu. La conservation de l'énergie globale à l'issue du processus d'absorption entraîne que l'énergie de l'état b au dessus du seuil d'ionisation, c'est-à-dire encore l'énergie cinétique finale $mv^2/2$ du photoélectron, une fois qu'il est séparé de l'ion, est reliée à l'énergie $\hbar\omega$ du photon incident et à l'énergie d'ionisation E_I par l'équation :

$$\hbar\omega = E_I + \frac{1}{2}mv^2 \quad (\text{B.2})$$

qui n'est autre que la relation d'Einstein.

Comme l'état final est nécessairement un continuum (par suite du caractère continu de E_b), la règle d'or de Fermi permet de calculer une probabilité de photoionisation par unité de temps et par suite, après division par le flux associé au photon incident, une section efficace de photoionisation.

Remarques

(i) La discussion précédente semble indiquer que la probabilité de photoionisation est nulle pour $\hbar\omega < E_I$ puisque l'absorption d'un photon $\hbar\omega$ ne peut alors porter l'atome dans le continuum d'ionisation. En fait, aux intensités élevées, l'atome peut être photoionisé même si $\hbar\omega < E_I$. Il s'agit alors d'un processus de photoionisation multiphotonique, au cours duquel l'atome absorbe n photons (avec $n > 1$) qui lui apportent une énergie $n\hbar\omega$ suffisante pour passer dans le continuum d'ionisation (voir partie D plus loin).

(ii) Pour $\hbar\omega$ suffisamment grand devant E_I , la probabilité de photoionisation décroît très vite quand ω croît. L'interprétation physique de cette décroissance rapide est simple. En effet, plus $\hbar\omega$ est grand devant E_I , plus l'électron atomique apparaît libre pour le photon incident. Or, on sait qu'un électron libre ne peut pas absorber *réellement* un photon. Pour le voir, considérons la figure 8.α où est représentée la relation entre l'énergie E et l'impulsion p pour un électron libre (parabole $E = p^2/2m$). Un électron libre initialement immobile (point 0) et absorbant un photon d'énergie $E = \hbar\omega$ et d'impulsion $p = E/c$ passe du point 0 au point 0' (la droite 00' a une pente c pratiquement verticale devant la pente des tangentes à la parabole qui vaut $p/m = v \ll c$). L'électron « quitte donc la parabole » de sorte que la transition correspondante ne peut être réelle. Ceci reste vrai même si l'électron n'est pas initialement immobile.

Par contre, dans un état lié, l'impulsion de l'électron n'est plus parfaitement définie. Par exemple, dans l'état fondamental $|\varphi_a\rangle$, d'énergie $-E_I$, la fonction d'onde a une certaine largeur dans l'espace des impulsions schématisée par le segment MN de la figure 8.β. Or, l'amplitude d'absorption d'un photon \mathbf{k} est proportionnelle à l'élément de matrice $\langle \varphi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) | \varphi_a \rangle$ où $|\varphi_a\rangle$ est l'état fondamental et $|\varphi_f\rangle$ l'état du continuum d'énergie $\hbar\omega - E_I$. Par ailleurs, l'opérateur

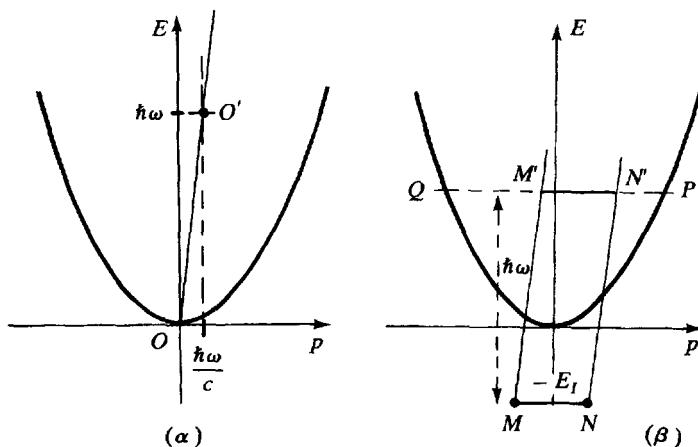


Figure 8. Diagrammes permettant de comprendre le rôle de la conservation de l'énergie et de l'impulsion dans l'absorption d'un photon par un électron libre (α) ou lié (β).

$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ est un opérateur de translation dans l'espace des impulsions, d'amplitude $\hbar\mathbf{k}$. L'amplitude d'absorption du photon est donc proportionnelle à l'intégrale de recouvrement, dans l'espace des impulsions, de la fonction d'onde $\epsilon \cdot \mathbf{p} \varphi_a(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})$ avec les fonctions d'onde $\varphi_f(\mathbf{p})$ des états du continuum d'énergie $\hbar\omega - E_I$. Sur la figure 8. β , la largeur de $\epsilon \cdot \mathbf{p} \varphi_a(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})$ est schématisée par le segment $M'N'$ obtenu à partir de MN par une translation $\hbar\omega/c$ sur l'axe des p et $\hbar\omega$ sur l'axe des E . Les fonctions $\varphi_f(\mathbf{p})$ sont schématisées par les points P et Q . Le recouvrement de ces fonctions peut être alors non nul et la transition est donc permise. Quand $\hbar\omega$ augmente, le segment $M'N'$ s'écarte des points P et Q et l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde associées diminue. Il est possible ainsi de comprendre qualitativement (*) pourquoi la section efficace de photoionisation décroît avec $\hbar\omega$ pour $\hbar\omega \gg E_I$.

b) DEUXIÈME EXEMPLE : PHOTODISSOCIATION

Dans ce deuxième exemple, emprunté à la physique moléculaire, l'état initial a est un état de vibration rotation de l'état électronique fondamental d'une molécule stable (le potentiel effectif présente un minimum dans cet état -voir Fig. 9-). L'absorption d'un photon $\hbar\omega$ porte la molécule dans un état électronique excité dissociatif b .

Ainsi, l'absorption d'un photon $\hbar\omega$ brise la molécule. On dit qu'il y a photodissociation (**).

(*) Pour plus de détails, voir Bethe and Salpeter, section 69.

(**) Voir par exemple Herzberg, chapitre VII.

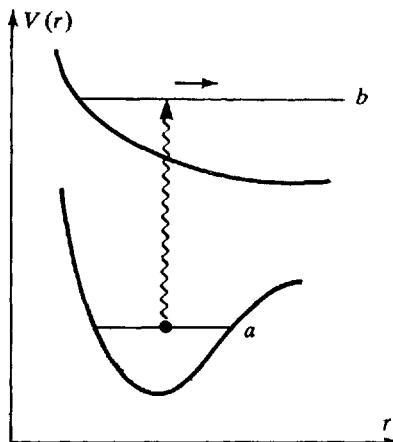


Figure 9. Photodissociation d'une molécule par absorption d'un photon.

3. Absorption entre deux états du continuum d'ionisation : Bremsstrahlung inverse

La figure 10 représente une transition entre deux états a et b du continuum d'ionisation d'un atome par absorption d'un photon. Une telle transition, appelée encore transition « free-free », s'accompagne d'une accélération de l'électron. Le processus correspondant, qui est l'inverse de celui de la figure 5, est appelé « Bremsstrahlung inverse ». Il joue un rôle important dans l'échauffement des électrons d'un plasma sous l'effet d'un rayonnement laser.

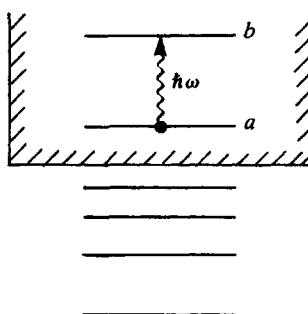


Figure 10. Transition entre deux états du continuum d'ionisation d'un atome par absorption d'un photon.

4. Influence de l'état initial du champ sur la dynamique du processus d'absorption

Revenons au problème de l'absorption entre deux états atomiques internes discrets, le niveau fondamental a et un état excité b (pour simplifier, nous supposons l'atome infiniment lourd et ignorons les nombres quantiques externes). Nous allons essayer d'identifier la nature discrète ou continue de l'état final du système global atome + rayonnement, et montrer que plusieurs comportements temporels sont possibles suivant la nature de l'état du rayonnement incident.

Supposons tout d'abord le rayonnement incident monochromatique et résonnant. Par exemple, un seul mode $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$ est peuplé et contient N photons de fréquence $\omega_0 = ck_0$ égale à la fréquence de la transition atomique $(E_b - E_a)/\hbar$. L'état initial du système global est donc $|\varphi_i\rangle = |a; N\mathbf{k}_0 \epsilon_0\rangle$ (atome dans l'état a en présence de N photons $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$, tous les autres modes étant vides). L'hamiltonien d'interaction H_{I1} couple cet état $|\varphi_i\rangle$ à un autre état $|\varphi_f\rangle = |b; (N-1)\mathbf{k}_0 \epsilon_0\rangle$ représentant l'atome dans l'état excité b en présence de $N-1$ photons $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$, tous les autres modes étant vides. Par suite du caractère résonnant de l'excitation, la perte d'énergie liée à la disparition d'un photon est compensée par le gain d'énergie interne de l'atome, et les deux états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ ont même énergie (partie gauche de la figure 11).

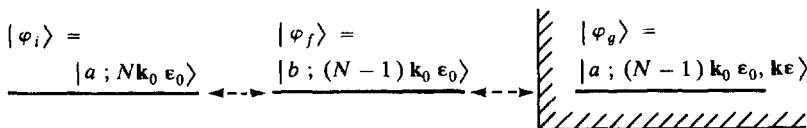


Figure 11. Quelques états importants du système global « atome + rayonnement » intervenant dans l'étude du processus d'absorption.

Etudions maintenant les états auxquels est couplé l'état $|\varphi_f\rangle$. En plus du couplage avec l'état $|\varphi_i\rangle$, nous devons également envisager la possibilité qu'à l'atome de retomber dans l'état a en émettant un photon dans un mode $k\epsilon$ qui était initialement vide. Les $N-1$ photons $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$ restent spectateurs dans une telle transition qui n'est autre que la transition étudiée dans le paragraphe A-1 pour décrire l'émission spontanée d'un photon $k\epsilon$ à partir de l'état b . L'état $|\varphi_f\rangle$ est donc couplé également à tous les états $|\varphi_g\rangle = |a; (N-1)\mathbf{k}_0 \epsilon_0, k\epsilon\rangle$ (atome dans l'état fondamental a en présence de $N-1$ photons $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$ et d'un photon $k\epsilon$) qui forment un continuum (partie droite de la figure 11). L'analyse précédente montre ainsi que, si l'on part de l'état $|\varphi_i\rangle$, l'état $|\varphi_f\rangle$ n'est pas un « véritable état final » puisqu'il est également couplé

au continuum des états $|\varphi_g\rangle$. D'ailleurs, le passage de $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_g\rangle$ via $|\varphi_f\rangle$, c'est-à-dire l'apparition d'un nouveau photon \mathbf{k} accompagnée de la disparition d'un photon incident $\mathbf{k}_0\epsilon_0$, n'est autre qu'un processus de *diffusion*, dont l'importance apparaît ainsi clairement et sur lequel nous reviendrons dans la partie suivante C.

L'évolution temporelle du système global partant de l'état $|\varphi_i\rangle$, qui peut être étudiée sur l'amplitude $\langle\varphi_i|\tilde{U}(T)|\varphi_i\rangle$, est simple dans un certain nombre de cas que nous abordons maintenant. Considérons auparavant l'évolution de l'état $|\varphi_f\rangle$ dans les deux cas limites où l'on peut ignorer, soit le couplage de droite avec les états $|\varphi_g\rangle$, soit le couplage de gauche avec l'état $|\varphi_i\rangle$. Si l'état $|\varphi_f\rangle$ n'était couplé qu'à l'état $|\varphi_i\rangle$, le problème serait ramené à celui de deux états discrets de même énergie et couplés l'un à l'autre (voir chapitre I, § B-1). L'évolution du système serait alors une nutation de Rabi entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ s'effectuant à la fréquence de Rabi Ω_1 proportionnelle au produit du moment dipolaire d_{ab} de la transition $a \leftrightarrow b$ par $\sqrt{\langle E^2 \rangle}$, où $\langle E^2 \rangle$ est la valeur moyenne du carré du champ électrique au point où se trouve l'atome, évaluée dans l'état $|N\mathbf{k}_0\epsilon_0\rangle$. Cette fréquence de Rabi, proportionnelle à \sqrt{N} , est d'autant plus élevée que N est plus grand. Par ailleurs, si l'état $|\varphi_f\rangle$ n'était couplé qu'au continuum $|\varphi_g\rangle$, il se désintégrerait exponentiellement vers ce continuum avec une durée de vie $\tau = 1/\Gamma$ (voir § A-1 ci-dessus). Les deux cas limites correspondent donc aux deux situations $\Omega_1 \gg \Gamma$ et $\Omega_1 \ll \Gamma$. Dans le premier cas (onde monochromatique intense), on peut, en première approximation, ignorer l'émission spontanée de b . L'atome oscille entre a et b à la fréquence de Rabi Ω_1 , et cette nutation rapide est lentement amortie avec une constante de temps de l'ordre de Γ^{-1} . Dans ce cas, il n'est bien sûr pas question de parler de probabilité d'absorption par unité de temps, ni de section efficace d'absorption. Dans le deuxième cas (excitation monochromatique faible), on peut ignorer en première approximation le couplage de $|\varphi_f\rangle$ avec $|\varphi_i\rangle$. La diagonalisation du couplage de droite de la figure 11 dans le sous espace formé par l'état discret $|\varphi_f\rangle$ et le continuum $\{|\varphi_g\rangle\}$ ne donne qu'un seul continuum de nouveaux états $|\psi_\mu\rangle$ dans lequel la densité d'état $|\varphi_f\rangle$ (au voisinage de l'énergie non perturbée de $|\varphi_f\rangle$) est de l'ordre de $1/\hbar\Gamma$ (un état sur un intervalle $\hbar\Gamma$) : l'état $|\varphi_f\rangle$ est en quelque sorte « dissous » dans le continuum $\{|\psi_\mu\rangle\}$ sur un intervalle de largeur de l'ordre de $\hbar\Gamma$ (voir complément C_I). Le couplage de l'état $|\varphi_i\rangle$ avec ce nouveau continuum fait alors apparaître une probabilité de désintégration de $|\varphi_i\rangle$ par unité de temps qui, d'après la règle d'or de Fermi, est de l'ordre de $(1/\hbar) \times (\text{carré du couplage entre } |\varphi_i\rangle \text{ et } |\varphi_f\rangle) \times (\text{densité d'état } |\varphi_f\rangle \text{ dans le nouveau continuum})$, c'est-à-dire encore de l'ordre de $(1/\hbar) \times \hbar^2\Omega_1^2 \times (1/\hbar\Gamma) = \Omega_1^2/\Gamma$. Il est donc possible dans

ce cas de définir une probabilité d'absorption par unité de temps, proportionnelle à Ω_1^2 , donc à N , donc à l'intensité ou au flux incident, et par suite d'en déduire une section efficace d'absorption.

Toutes les considérations précédentes sont relatives à un rayonnement incident monochromatique. Supposons maintenant que, dans l'état initial, l'atome soit en présence de N_1 photons $\mathbf{k}_1\epsilon_1$, N_2 photons $\mathbf{k}_2\epsilon_2\dots$ N_i photons $\mathbf{k}_i\epsilon_i\dots$, les fréquences $\omega_1 = ck_1$, $\omega_2 = ck_2\dots$ $\omega_i = ck_i\dots$ formant un ensemble très resserré, assimilable à un spectre continu. L'état initial $|\varphi_i\rangle = |a; N_1\mathbf{k}_1\epsilon_1\dots N_i\mathbf{k}_i\epsilon_i\dots\rangle$ est alors couplé à un très grand nombre d'états $|\varphi_f\rangle = |b; N_1\mathbf{k}_1\epsilon_1\dots (N_i - 1)\mathbf{k}_i\epsilon_i\dots\rangle$ correspondant à l'atome dans l'état b , un photon $\mathbf{k}_i\epsilon_i$ ayant été absorbé. Comme $\omega_i = ck_i$ peut prendre un très grand nombre de valeurs, les états $|\varphi_f\rangle$ forment maintenant un continuum, au lieu de se réduire au seul état discret de la figure 11 dans le cas monochromatique. Même si le couplage de ces états $|\varphi_f\rangle$ avec les états $|\varphi_g\rangle$ associés à l'émission spontanée d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ à partir de b est ignoré, le problème de l'évolution temporelle de $|\varphi_i\rangle$ est alors celui d'un état discret couplé à un continuum, et il est possible de définir une probabilité d'absorption par unité de temps dont on peut se convaincre aisément qu'elle est proportionnelle à la valeur de l'intensité incidente en $\omega = \omega_0$. Il est possible ainsi de retrouver les coefficients B d'Einstein décrivant l'absorption et l'émission induite (voir aussi chapitre IV, partie E).

Nous nous sommes limités, dans les exemples précédents, à des états stationnaires pour le champ incident (états propres de H_R). Il est aisément d'imaginer la grande variété de situations qui peuvent être réalisées avec des rayonnements incidents non stationnaires (excitation en impulsion).

C – PROCESSUS DE DIFFUSION : UN PHOTON DISPARAÎT ET UN AUTRE PHOTON APPARAÎT

1. Amplitude de diffusion - Représentation diagrammatique

Dans un processus de diffusion, le système global passe d'un état initial $|\varphi_i\rangle$ où l'atome est dans un état a en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ à un état final $|\varphi_f\rangle$ où l'atome est dans l'état a' en présence d'un autre photon $\mathbf{k}'\epsilon'$. Trois chemins possibles permettent de relier $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_f\rangle$: l'atome absorbe le photon $\mathbf{k}\epsilon$ et passe dans l'état b puis émet le photon $\mathbf{k}'\epsilon'$ et passe dans l'état a' (Fig. 12α) ; il peut également émettre tout d'abord le photon $\mathbf{k}'\epsilon'$ avant d'absorber le photon $\mathbf{k}\epsilon$ (Fig. 12β) ; enfin, l'absorption de $\mathbf{k}\epsilon$ et l'émission de $\mathbf{k}'\epsilon'$ peuvent être simultanées (Fig. 12γ). Les deux processus 12α et 12β correspondent à l'action de H_{I1} au deuxième ordre avec un état intermédiaire, alors que le processus 12γ est associé à l'action de H_{I2} au premier ordre (voir chapitre I, § C-5 et figure 2) :

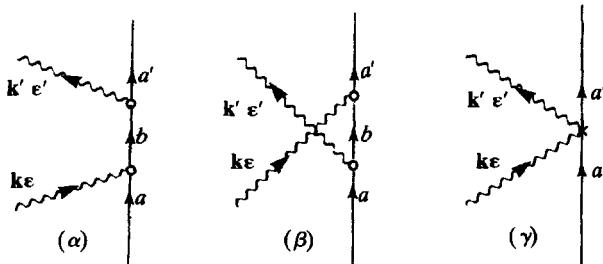


Figure 12. Représentation des divers types de chemins possibles reliant l'état initial et l'état final d'un processus de diffusion.

D'après la formule (B.14) du chapitre I, les trois amplitudes \mathcal{C}_{fi} associées à ces trois chemins valent respectivement, à l'ordre le plus bas :

$$\mathcal{C}_{fi}^{\alpha} = \sum_b \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{\langle a'; \mathbf{k}'\epsilon' | H_{I1} | b; 0 \rangle \langle b; 0 | H_{I1} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle}{E_a + \hbar\omega - E_b + i\eta} \quad (\text{C.1.a})$$

$$\mathcal{C}_{fi}^{\beta} = \sum_b \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{\langle a'; \mathbf{k}'\epsilon' | H_{I1} | b; \mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon' \rangle \langle b; \mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon' | H_{I1} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle}{E_a - \hbar\omega' - E_b + i\eta} \quad (\text{C.1.b})$$

$$\mathcal{C}_{fi}^{\gamma} = \langle a'; \mathbf{k}'\epsilon' | H_{I2} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle \quad (\text{C.1.c})$$

H_{I1} et H_{I2} sont les hamiltoniens d'interaction à un et deux photons

donnés par les expressions (C.5.b) et (C.5.d) du chapitre I. Nous négligeons ici H_{I1}^S et les effets liés aux spins.

Remarque

Dans le point de vue dipolaire électrique (voir appendice, § 5), l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le rayonnement ne contient que des termes linéaires en a et a^\dagger de sorte que, dans ce point de vue, la diffusion apparaît toujours comme un processus au deuxième ordre en hamiltonien d'interaction H'_I . Il n'y a alors que deux chemins possibles associés à des diagrammes du type 12 α et 12 β .

L'état intermédiaire du processus 12 β n'est jamais discret à cause de la présence des photons $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$. Par contre, l'état intermédiaire du processus 12 α peut être discret si l'état atomique b est discret. Dans un tel cas, le dénominateur d'énergie de (C.1.a) peut conduire à une divergence (*) de \mathcal{T}_{fi}^α si $\hbar\omega$ est égal à $E_b - E_a$, c'est-à-dire si la fréquence ω du photon incident est résonnante avec la fréquence $(E_b - E_a)/\hbar$ de la transition $b \rightarrow a$. Il s'agit là d'un processus de diffusion résonnante que nous excluons pour le moment et sur lequel nous reviendrons plus loin (§ C-3).

La conservation de l'énergie globale entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ entraîne (pour un atome infiniment lourd dont on néglige le recul) :

$$E_a + \hbar\omega = E_{a'} + \hbar\omega' \quad (\text{C.2})$$

Si l'atome n'a pas changé d'état à l'issue du processus de diffusion ($a' = a$), on a $E_{a'} = E_a$ et par suite, d'après (C.2), $\omega' = \omega$. La diffusion est dite élastique. Si a' diffère de a , la diffusion est inélastique et la variation d'énergie du photon $\hbar(\omega' - \omega)$ reflète la variation d'énergie atomique $E_a - E_{a'}$.

Notons enfin l'existence d'une autre représentation diagrammatique très fréquemment utilisée du processus α (Fig. 13) :

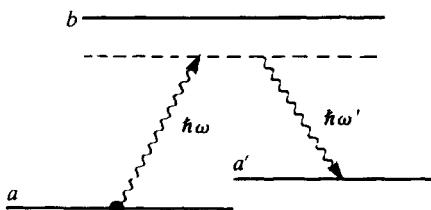


Figure 13. Autre représentation diagrammatique du processus α de la figure 12.

(*) Si l'état b appartient au spectre continu atomique, la présence de $i\eta$ au dénominateur de (C.1.a) fait apparaître une partie principale et une fonction delta qui donnent des résultats finis lors de l'intégration sur l'énergie E_b de b , même si $E_b - E_a$ peut coïncider avec $\hbar\omega$.

L'absorption du photon $\hbar\omega$ est schématisée par une flèche montante joignant l'état a à une ligne pointillée située à une distance $\hbar\omega$ au-dessus de a . L'émission de $\hbar\omega'$ est schématisée par une flèche descendante reliant cette ligne pointillée à l'état a' . L'avantage de cette représentation est que la distance entre l'état b et la ligne pointillée de la figure 13 visualise très clairement le défaut d'énergie de l'état intermédiaire du processus de diffusion. La diffusion est résonnante quand la ligne pointillée coïncide avec l'état b . On peut se demander si une telle ligne pointillée représente un niveau d'énergie. En fait, il ne s'agit pas d'un niveau atomique, mais d'un niveau du système global : atome dans l'état a + un photon $k\varepsilon$, ou encore atome dans l'état a' + un photon $k'\varepsilon'$ (ces deux états ont même énergie d'après (C.2)). L'état b de la figure 13 peut lui aussi être considéré comme un état du système global, atome dans l'état b sans aucun photon. On comprend ainsi clairement pourquoi l'écart entre le niveau b et la ligne pointillée de la figure 13 représente le défaut d'énergie du système global dans l'état intermédiaire du processus α .

Nous avons considéré dans ce qui précède la diffusion d'un photon par un atome. Un photon peut être également diffusé par un électron libre (alors que, rappelons le, il ne peut pas être absorbé ou émis de manière réelle par un électron libre). Un tel processus n'est autre que la *diffusion Compton*. Les diagrammes α , β , γ de la figure 12 demeurent valables à condition de considérer a , b , a' , comme les nombres quantiques repérant l'état d'un électron libre (par exemple, impulsion et spin). La résolution des équations de conservation de l'énergie globale et de l'impulsion globale entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ donne l'expression bien connue du déplacement de fréquence Compton.

2. Différents types de diffusion d'un photon par un système atomique ou moléculaire

Suivant l'énergie du photon incident et le caractère élastique ou inélastique de la diffusion, des dénominations différentes sont utilisées pour désigner la diffusion d'un photon par un atome ou une molécule. Nous passons maintenant en revue quelques exemples de tels processus.

a) DIFFUSION ÉLASTIQUE À BASSE ÉNERGIE : DIFFUSION RAYLEIGH

L'énergie $\hbar\omega$ du photon incident est supposée très petite devant l'énergie d'ionisation E_I de l'atome, et donc devant les différences d'énergie $E_b - E_a$ séparant le niveau atomique initial a , qui est en général l'état fondamental, des états électroniques excités b apparaissant dans l'état intermédiaire :

$$\hbar\omega \ll E_I, |E_b - E_a| \quad (\text{C.3})$$

Comme la diffusion est élastique, on a $a' = a$, et $\hbar\omega' = \hbar\omega$. La diffusion Rayleigh est donc la diffusion, sans changement de fréquence, d'un atome ou d'une molécule irradiés par un rayonnement de fréquence très inférieure aux fréquences de résonance (figure 14) :

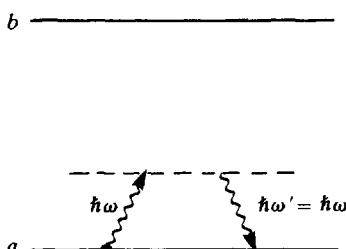


Figure 14. Diffusion Rayleigh.

Il est possible de montrer que la section efficace de diffusion Rayleigh est proportionnelle à ω^4 (elle croît très vite avec la fréquence du photon incident), et à la polarisabilité statique du système atomique dans l'état a (voir exercice 3).

b) DIFFUSION INÉLASTIQUE À BASSE ÉNERGIE : DIFFUSION RAMAN

L'énergie $\hbar\omega$ du photon est toujours supposée petite devant l'énergie d'ionisation E_I , mais l'état final a' du système atomique est maintenant différent de a . La diffusion, qui est alors appelée diffusion Raman, s'accompagne donc d'un changement de fréquence, $\omega - \omega'$, égal d'après (C.2) à $(E_{a'} - E_a)/\hbar$. En général, les niveaux a et a' sont des niveaux de vibration-rotation différents d'une molécule, et la mesure du décalage en fréquence entre la lumière incidente et la lumière diffusée permet de déterminer les fréquences de vibration et de rotation de la molécule (*).

Suivant que le niveau moléculaire initial a est inférieur ou supérieur en énergie au niveau final a' , on parle de diffusion Raman *Stokes* (figure 15 α) ou *anti-Stokes* (figure 15 β). La lumière diffusée a une fréquence ω' inférieure à ω dans le premier cas, supérieure dans le second.

Remarque

Supposons que les modes ω et ω' (figure 15 α) soient tous deux initialement peuplés. Il est possible alors d'envisager le processus *inverse* du processus 15 α , où la molécule, initialement dans l'état a' , aboutit dans l'état a en absorbant un photon $\hbar\omega'$ et en émettant un photon $\hbar\omega$ (figure 16).

(*) Voir par exemple Herzberg, chapitre II, § 4.

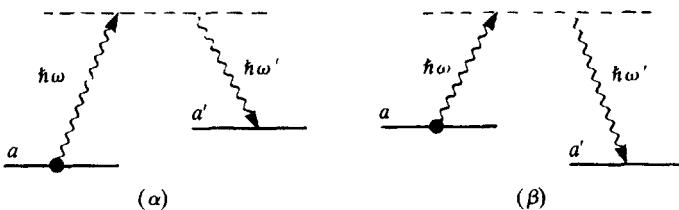


Figure 15. Diffusion Raman Stokes (α) et anti-Stokes (β).

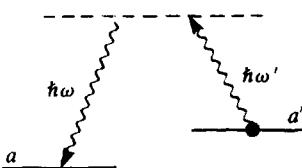


Figure 16. Processus Raman inverse de celui de la figure 15 α .

Les processus de la figure 15 α amplifient le rayonnement à la fréquence ω' (par absorption d'un photon $\hbar\omega$ et émission stimulée d'un photon $\hbar\omega'$), alors que les processus de la figure 16 l'atténuent (par absorption d'un photon $\hbar\omega'$ et émission stimulée d'un photon $\hbar\omega$). Mais l'état moléculaire initial n'est pas le même dans les deux cas, de sorte que les processus d'amplification et d'atténuation sont respectivement proportionnels aux nombres N_a et $N_{a'}$ de molécules dans les états a et a' . Si $N_a > N_{a'}$, le milieu moléculaire présente globalement un gain pour la fréquence ω' . On conçoit ainsi qu'on puisse obtenir une oscillation laser à la fréquence ω' si le gain du milieu, enfermé dans une cavité accordée à ω' , l'emporte sur les pertes. C'est là le principe des lasers à effet Raman stimulé (*).

c) DIFFUSION ÉLASTIQUE À HAUTE ÉNERGIE : DIFFUSION THOMSON

L'énergie $\hbar\omega$ du photon incident est supposée maintenant grande devant l'énergie d'ionisation E_I de l'atome. La diffusion élastique, avec $a' = a$ et $\omega' = \omega$ (figure 17) est appelée dans ce cas diffusion *Thomson*. Celle-ci joue un rôle prépondérant dans la diffusion de rayons X mous par les atomes.

Le calcul quantique de la section efficace totale de diffusion Thomson σ_T (voir exercice 4) donne, à la limite où la longueur d'onde λ du rayonnement incident est grande devant les dimensions atomiques

(*) Voir par exemple Bloembergen, § 4-5 ; Shen, chap. 10 ; W. Kaiser and M. Maier dans Laser Handbook (édité par F.T. Arecchi et E.O. Schultz-Dubois) Vol. 2, p. 1077, North Holland (Amsterdam 1972) ; Hanna, Yuratich and Cotter, chap. 5 et 6.

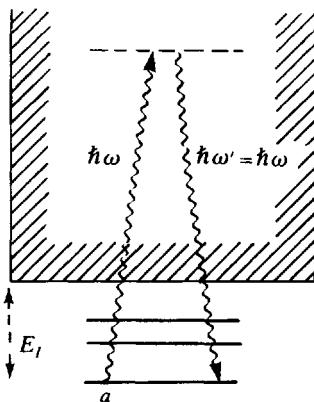


Figure 17. Diffusion Thomson.

a_0 (*), le résultat bien connu $\sigma_T = 8\pi r_0^2/3$ (où r_0 est le rayon classique de l'électron), c'est-à-dire la section efficace de diffusion d'une onde monochromatique par un *électron libre classique*. Un tel résultat montre que la diffusion Thomson par un électron atomique peut être interprétée en termes semiclassiques. L'onde incidente fait vibrer l'électron à une fréquence ω très supérieure à celles de son mouvement autour du noyau (de l'ordre de E_I/\hbar). Tout se passe en première approximation comme si l'électron atomique était libre. D'ailleurs, lorsque $\hbar\omega \gg E_I$, c'est l'amplitude (C.1.c) qui est la plus importante, comme pour l'électron libre, et non pas (C.1.a). La contribution de cette dernière est en effet diminuée par le facteur $\hbar\omega$ au dénominateur.

d) DIFFUSION INÉLASTIQUE À HAUTE ÉNERGIE AVEC ÉTAT ATOMIQUE FINAL DANS LE CONTINUUM D'IONISATION : DIFFUSION COMPTON

Nous supposons enfin que $\hbar\omega$ est très grand devant E_I , suffisamment grand même pour que la longueur d'onde λ soit petite devant les dimensions atomiques a_0 . La liaison de l'électron au noyau joue alors un rôle peu important dans la diffusion qui doit ressembler beaucoup à la diffusion Compton par un électron libre. On conçoit ainsi aisément que les processus de diffusion importants soient des processus inélastiques où l'atome est ionisé dans l'état final (figure 18).

Les impulsions $\hbar k$ et $\hbar k'$ des photons incident et diffusé, l'impulsion p_0 de l'électron dans l'état final a' , sont alors très grandes devant celle

(*) Pour un atome d'hydrogène, les conditions $\hbar\omega \gg E_I$ et $\lambda \gg a_0$, considérées dans ce paragraphe, correspondent à l'intervalle d'énergie $[\alpha^2 mc^2 - \alpha mc^2]$, où α est la constante de structure fine. Voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », chapitre III, figure 2.

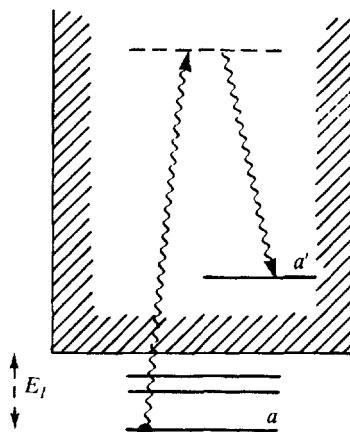


Figure 18. Diffusion Compton par un électron atomique.

de l'électron dans l'état initial a , qui est distribuée sur un intervalle de largeur de l'ordre de \hbar/a_0 autour d'une valeur moyenne nulle. En première approximation, on peut donc assimiler le processus de la figure 18 à un processus de diffusion Compton par un électron libre initialement immobile. Les corrections à cette approximation sont dues à la distribution des valeurs de l'impulsion de l'électron dans l'état initial et dans l'état final et donnent donc des informations sur les fonctions d'onde atomiques. Comme pour la diffusion Thomson, c'est l'amplitude (C.1.c) qui est prépondérante.

Remarque

Il est possible d'analyser la diffusion Compton par un électron libre ou lié au moyen de diagrammes énergie - impulsion analogues à ceux de la figure 8. Ainsi, la figure 19a schématisé la diffusion Compton par un électron libre initialement immobile. Afin de pouvoir raisonner sur des figures à deux dimensions, avec l'énergie en ordonnée et l'impulsion en abscisse, nous nous limitons à la diffusion vers l'arrière, les impulsions $\hbar k$ et $\hbar k'$ des photons incident et diffusé étant de sens opposés. On voit sur la figure 19a qu'il est possible, partant du point 0 de la parabole, d'aboutir à un autre point $0''$ de la parabole en effectuant successivement la translation $00'$ correspondant à l'absorption du photon incident $\hbar\omega, \hbar k$ et la translation $0'0''$ correspondant à l'émission du photon diffusé $\hbar\omega', \hbar k'$. Le processus de diffusion peut donc être réel. Pour un électron lié, il faut partir de l'état fondamental, dont la fonction d'onde $\varphi_a(\mathbf{p})$ est, comme sur la figure 8, schématisée par un segment horizontal MN , situé à l'ordonnée $-E_I$. A haute énergie ($\hbar\omega \gg E_I$), le terme prépondérant de l'amplitude de diffusion Compton est donné par l'expression (C.1.c) qui est, d'après l'expression de H_{I2} (voir formule (C.5.d) du chapitre I), proportionnelle à

$\langle \varphi_{a'} | \exp i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r} | \varphi_a \rangle$. On obtient ainsi l'intégrale de recouvrement de la fonction d'onde de l'état fondamental $\varphi_a(\mathbf{p})$, translatée de $\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, avec la fonction d'onde $\varphi_a^*(\mathbf{p})$ de l'état du continuum d'énergie $-E_I + \hbar(\omega - \omega')$. Sur la figure 19 β, ces deux fonctions d'onde sont schématisées respectivement par le segment $M''N''$ (obtenu à partir de MN par une suite de deux translations $\hbar\omega, \hbar\mathbf{k}$ et $-\hbar\omega', -\hbar\mathbf{k}'$) et par les points P et Q (correspondant à l'intersection de la parabole par l'horizontale d'ordonnée $-E_I + \hbar\omega - \hbar\omega'$). A cause de la largeur finie de $M''N''$, l'intégrale de recouvrement précédente peut être importante pour toute une série de valeurs de ω' , ω étant fixé. La raie de diffusion Compton par un électron lié n'est donc pas infiniment étroite (dans une direction de diffusion donnée), à la différence de ce qui se passe pour un électron libre.

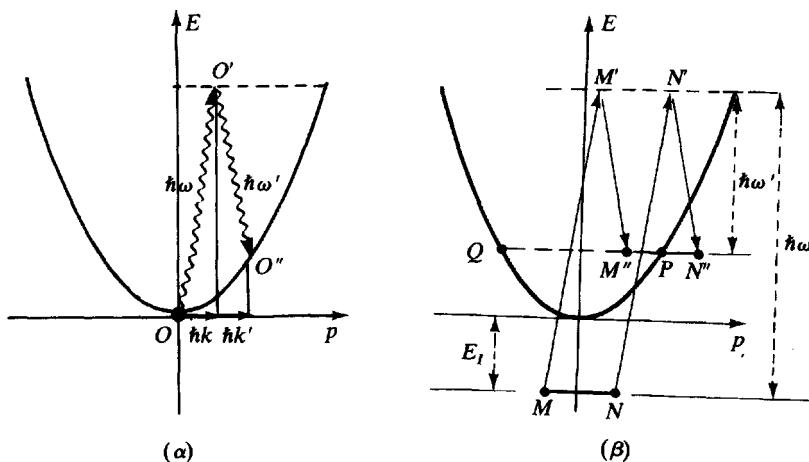


Figure 19. Schématisation par des diagrammes énergie-impulsion de la diffusion Compton par un électron libre initialement immobile (α) et par un électron lié (β).

3. Diffusion résonnante

Nous revenons maintenant au cas où la fréquence ω du photon incident est très voisine de la fréquence $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ d'une transition atomique entre deux états *discrets* a et b . Le processus α de la figure 12 est alors prépondérant devant les deux autres, puisque l'amplitude (C.1.a) qui lui est associée diverge à résonance. Nous nous concentrerons donc dans ce paragraphe sur l'étude de ce processus. Pour fixer les idées, nous prendrons $a' = a$ (diffusion élastique), et nous supposerons qu'il n'y a qu'un seul photon incident $k\epsilon$.

Sur la figure 20, nous avons représenté les états du système global atome + rayonnement qui jouent un rôle important dans le processus de diffusion.

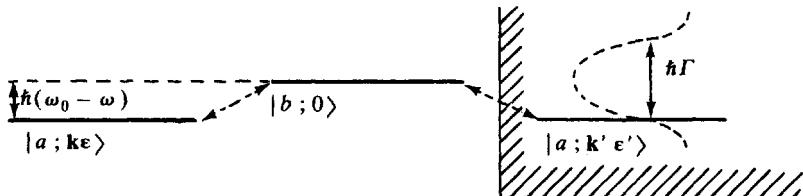


Figure 20. Quelques états importants du système global atome + rayonnement intervenant dans l'étude du processus de diffusion résonnante.

L'état final du processus de diffusion, $|a;k'\epsilon'\rangle$, a même énergie que l'état initial $|a;k\epsilon\rangle$. Ces deux états appartiennent d'ailleurs tous deux au même continuum d'états (atome dans l'état a en présence d'un photon). À l'ordre le plus bas en H_{I1} , les états initial et final du processus de diffusion sont couplés indirectement via l'état discret $|b;0\rangle$. On peut faire varier à volonté la différence $\hbar(\omega_0 - \omega)$ entre l'énergie de l'état $|b;0\rangle$ et celle de l'état initial, en balayant ω autour de ω_0 .

Pour comprendre qualitativement comment on peut résoudre la difficulté liée à la divergence de l'amplitude (C.1.a), quittons le point de vue perturbatif qui est utilisé pour établir (C.1.a) et essayons de comprendre la dynamique du système représenté par les seuls états de la figure 20 et leurs couplages mutuels (représentés par les flèches en pointillés). Nous remplaçons donc l'élément de matrice de transition (C.1.a), valable à l'ordre le plus bas en H_{I1} , par

$$\mathcal{C}_{ak'\epsilon',ake} = \langle a;k'\epsilon' | H_{I1} \frac{1}{E_a + \hbar\omega - H + i\eta} H_{I1} | a;k\epsilon \rangle \quad (\text{C.4})$$

valable à tous les ordres en H_{I1} (c'est H et non H_0 qui apparaît dans le dénominateur d'énergie associé à l'état intermédiaire (voir l'équation (B.15) du chapitre I)).

Il apparaît ainsi que, dans une théorie à tous les ordres en H_{I1} , ce n'est pas l'état discret $|b;0\rangle$ qui doit être considéré comme l'état intermédiaire du processus de diffusion, comme cela est suggéré par la figure 20, mais l'ensemble de tous les états propres de l'hamiltonien total H . Or, quand on se limite aux seuls états de la figure 20, les états propres de H forment un continuum (voir le complément C.1 : l'état discret $|b;0\rangle$ se dissout dans le continuum des états propres de H). La somme sur les états intermédiaires figurant dans l'expression

(C.4) est donc une somme sur un continuum ne conduisant à aucune divergence (grâce au $+ i\eta$ du dénominateur qui introduit une partie principale et une fonction delta). De plus, comme l'hamiltonien d'interaction H_{I1} ne couple l'état initial et l'état final qu'à la composante des états propres de H sur l'état discret $|b;0\rangle$, il apparaît clairement sur l'expression (C.4) que la somme sur les états intermédiaires fait intervenir la densité d'état discret $|b;0\rangle$ dans le nouveau continuum des états propres de H , densité qui varie de manière résonnante sur un intervalle de largeur $\hbar\Gamma$ autour de l'énergie E_b (voir complément C_I). On s'attend donc à ce que, tout en restant finie, l'amplitude de diffusion varie de manière résonnante quand la fréquence ω du photon incident est balayée autour de $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$.

La discussion qualitative précédente est confirmée par le calcul simple présenté dans le complément C_I. Rappelons en ici le résultat : il suffit de remplacer au dénominateur de (C.1.a) l'énergie non perturbée E_b de $|b;0\rangle$ par $E_b - i\hbar(\Gamma/2)$. Notons qu'une telle modification revient à remplacer l'exponentielle d'évolution $\exp(-iE_bt/\hbar)$ de l'état $|b;0\rangle$ par $\exp(-iE_bt/\hbar)\exp(-\Gamma t/2)$, et fait bien apparaître la décroissance exponentielle de l'amplitude de présence dans l'état b . L'expression non perturbative de la matrice de transition au voisinage de la résonance est donc finalement :

$$\mathcal{C}_{fi}^{res} = \frac{\langle a;\mathbf{k}'\epsilon'|H_{I1}|b;0\rangle \langle b;0|H_{I1}|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle}{\hbar\omega + E_a - E_b + i\hbar\frac{\Gamma}{2}} \quad (C.5)$$

c'est-à-dire une expression dont le module et la phase varient très rapidement sur un intervalle de largeur Γ autour de $\omega = \omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$. Le caractère non perturbatif de (C.5) apparaît bien si l'on développe en série le dénominateur :

$$\frac{1}{\hbar[\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2}]} = \frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(i\Gamma/2)^n}{(\omega - \omega_0)^{n+1}} \quad (C.6)$$

La présence de Γ , qui est d'ordre 2 en H_{I1} (voir A.5), au dénominateur de (C.5) est bien équivalente, d'après (C.6), à la somme d'une infinité de termes de puissances croissantes en H_{I1} .

L'expression (C.6) peut également être interprétée en termes semi-classiques. Considérons en effet un oscillateur classique de fréquence propre ω_0 , amorti avec une constante de temps Γ^{-1} . Si cet oscillateur est soumis à une excitation monochromatique de fréquence ω , sa « réponse » aura un module et une phase variant de manière résonnante sur une plage de largeur Γ autour de $\omega = \omega_0$, et décrits par le même facteur $[\omega - \omega_0 + i(\Gamma/2)]^{-1}$ que celui figurant dans (C.6).

L'analogie précédente permet de comprendre très simplement les caractéristiques essentielles de la lumière diffusée au voisinage de la résonance, que l'on appelle encore la « *fluorescence de résonance* ». Si la lumière incidente est monochromatique, la lumière diffusée est également monochromatique (*), avec la même fréquence, et son intensité varie avec l'écart à résonance $\omega - \omega_0$ comme une lorentzienne de largeur Γ . Si, par contre, le rayonnement incident a un spectre très plat au voisinage de $\omega - \omega_0$, les différentes composantes de ce spectre vont être diffusées avec une efficacité proportionnelle à $[(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma^2/4)]^{-1}$ et la lumière diffusée aura un spectre lorentzien de largeur Γ , centré en $\omega = \omega_0$. Des considérations analogues peuvent être également utilisées pour comprendre la diffusion d'un paquet d'ondes. Si le paquet d'ondes est très long temporellement ($\Delta t \gg \Gamma^{-1}$), et par suite très étroit en fréquence ($\Delta\omega \ll \Gamma$), les différentes ondes constituant le paquet seront diffusées pratiquement de la même manière (puisque $\Delta\omega \ll \Gamma$), et le paquet d'ondes diffusé aura la même forme que le paquet d'ondes incident. Par contre, si le paquet d'onde est très court en temps ($\Delta t \ll \Gamma^{-1}$ -voir figure 21 α), et par suite très large en fréquence ($\Delta\omega \gg \Gamma$), le paquet d'ondes diffusé aura une allure différente (figure 21β) puisque, seules les composantes du paquet d'ondes de fréquence comprise dans un intervalle de largeur Γ autour de $\omega = \omega_0$ seront diffusées de manière appréciable. De manière plus précise, le paquet d'ondes diffusé a une dépendance temporelle donnée par le produit de convolution du paquet d'ondes incident par la transformée de Fourier de l'amplitude de diffusion $[\omega - \omega_0 + i(\Gamma/2)]^{-1}$. Après un front de montée analogue à celui du paquet d'ondes incident, le paquet d'ondes diffusé décroît exponentiel-

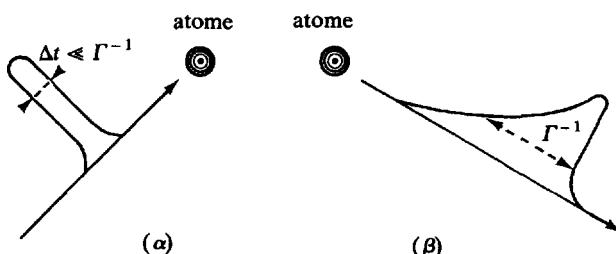


Figure 21. α – Schématisation d'un paquet d'ondes incident de largeur temporelle petite ($\Delta t \ll \Gamma^{-1}$)
 β – Allure du paquet d'ondes diffusé.

(*) Nous négligeons ici les processus de diffusion non linéaires en champ incident qui apparaissent aux intensités élevées (voir remarque (iii) à la fin de ce paragraphe).

lement sur un temps de l'ordre de Γ^{-1} . On peut dire encore que, dans ce deuxième cas ($\Delta t \ll \Gamma^{-1}$), la diffusion résonnante peut être décomposée en deux étapes : une excitation de l'atome pendant le temps très bref Δt de passage du paquet d'ondes, suivie de la décroissance exponentielle par émission spontanée de l'état excité ainsi préparé de manière quasi percussionnelle (voir aussi l'exercice 13).

Remarques

- (i) Tout état atomique discret b , autre que l'état fondamental, « disparaît » lorsqu'on tient compte du couplage entre l'état discret $|b;0\rangle$ et le continuum d'émission spontanée $|a;k'\epsilon'\rangle$. Son « souvenir » ne se manifeste plus que sous forme de « résonance dans l'amplitude de diffusion ». Le problème de l'émission spontanée à partir d'un état excité préparé à $t = 0$, (problème étudié dans le paragraphe A-1 ci-dessus), doit en fait être posé en termes de diffusion d'un paquet d'ondes étroit en temps, qui permet de « préparer percussionnellement l'état excité ».
- (ii) Nous avons ignoré dans tout ce paragraphe toute structure dans les états supérieur b et inférieur a . Des effets intéressants liés à l'existence de ces structures peuvent être observées sur la diffusion résonnante (résonance de croisement de niveaux, battements quantiques, pompage optique...). Voir l'exercice 6.
- (iii) Nous nous sommes limités également dans ce paragraphe au cas d'un rayonnement incident peu intense (un seul photon incident). A plus forte intensité, des effets nouveaux apparaissent, comme des processus de diffusion non linéaires impliquant plusieurs photons incidents (voir par exemple la figure 29.β plus loin). Plus généralement, la nutation de Rabi induite par un faisceau laser intense résonnant peut modifier considérablement le spectre de la lumière diffusée. Nous reviendrons sur ce problème plus loin (voir chapitres V et VI).

D - PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES : PLUSIEURS PHOTONS APPARAISSENT OU DISPARAISSENT

Les processus élémentaires d'émission et d'absorption que nous avons étudiés plus haut dans les parties A et B ne concernent chaque fois qu'un seul photon, qui apparaît ou disparaît au cours de la transition. Des processus plus complexes peuvent également se produire, dans lesquels le nombre de photons peut augmenter ou diminuer de *plusieurs unités*, l'énergie globale de l'état final du système particules + rayonnement étant bien sûr égale à celle de l'état initial (de même que l'impulsion globale et le moment cinétique global). De tels processus sont appelés *multiphotoniques*. Leur richesse est si grande qu'il est exclu de pouvoir en présenter ici une revue exhaustive. Nous nous contenterons plutôt de décrire qualitativement un petit nombre d'exemples simples. Avant de commencer, notons également que le processus de diffusion, étudié dans la partie C ci-dessus, peut lui aussi être considéré comme un processus multiphotonique, dans la mesure où *deux* photons sont « impliqués » au cours du processus, l'un qui disparaît ($\hbar\omega$) et l'autre qui apparaît ($\hbar\omega'$). Certes, le nombre total de photons est le même dans l'état final et dans l'état initial. Il n'empêche qu'un processus de diffusion est un « processus à deux photons » présentant de nombreuses analogies avec un processus d'absorption (ou d'émission) de deux photons.

1. Emission spontanée à deux photons

Considérons la transition $2s_{\frac{1}{2}} \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}$ de l'atome d'hydrogène. Par suite du théorème de Wigner-Eckart et de la symétrie de réflexion d'espace, la seule transition électromagnétique permise entre ces deux niveaux est une transition dipolaire magnétique *M1*. En fait, cette transition est extrêmement faible car elle ne peut provenir que du moment magnétique de spin M_s (le nombre quantique orbital étant nul dans les deux états), et M_s , qui n'agit que sur les degrés de liberté de spin, a un élément de matrice nul entre les fonctions d'ondes non relativistes des deux états (les parties orbitales et les parties de spin se séparent, et le produit scalaire des parties orbitales est nul). La probabilité d'émission spontanée d'un photon dipolaire magnétique sur la transition $2s_{\frac{1}{2}} \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}$, ne peut donc provenir que de corrections relativistes aux fonctions d'onde, et est tout à fait négligeable pour l'atome d'hydrogène (*).

(*) Il n'en est pas de même pour les ions hydrogénoides fortement chargés pour lesquels les effets relativistes sont beaucoup plus importants (la probabilité de transition *M1* varie en Z^{10}).

A l'ordre suivant de la théorie des perturbations (ordre 2), il est possible de faire apparaître une désintégration radiative de l'état $2s$ vers l'état $1s$ par émission spontanée de deux photons dipolaires électriques $E1$. La représentation diagrammatique des amplitudes de transition correspondantes est donnée sur la figure 22. L'atome émet un photon $k\epsilon$ (figure 22 α), en passant de l'état $2s$ à un état intermédiaire c (qui, par suite des règles de sélection des transitions dipolaires électriques, ne peut être qu'un état $p(l=1)$ du spectre discret ou continu), puis émet un deuxième photon $k'\epsilon'$ pour aboutir dans l'état $1s$. L'autre diagramme 22 β correspond à l'autre ordre possible d'émission des deux photons (*).

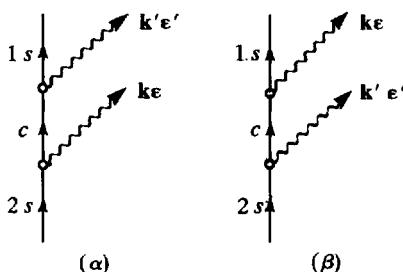


Figure 22. Emission spontanée de deux photons $k\epsilon$ et $k'\epsilon'$ sur la transition $2s \rightarrow 1s$.

La conservation de l'énergie globale à l'issue du processus implique que

$$E_{2s} - E_{1s} = \hbar\omega + \hbar\omega' \quad (\text{D.1})$$

et apparaît plus clairement sur l'autre représentation diagrammatique donnée sur la figure 23

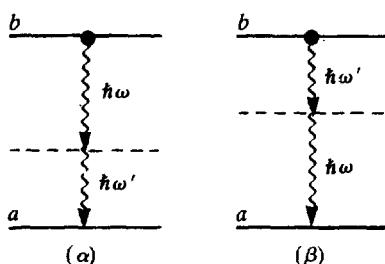


Figure 23. Autre représentation diagrammatique possible de l'émission spontanée de deux photons sur la transition $2s \rightarrow 1s$.

(*) Nous n'avons pas représenté l'amplitude associée à H_{12} , analogue à celle de la figure 2d du chapitre I (avec $a = 2s$ et $b = 1s$), car elle est nulle à l'approximation des grandes longueurs d'onde.

Le calcul de la probabilité d'émission spontanée par unité de temps de deux photons $k\epsilon, k'\epsilon'$, sommée sur toutes les paires de photons satisfaisant (D.1), conduit à une durée de vie radiative de l'état $2s$ beaucoup plus courte que celle associée à l'émission spontanée d'un photon $M1$ sur la transition $2s_{\frac{1}{2}} \rightarrow 1s_{\frac{1}{2}}$, ou d'un photon $E1$ sur la transition $2s_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2p_{\frac{1}{2}}$ (*). On peut donc dire que la désintégration radiative de l'état $2s$ est dominée par un processus d'émission spontanée à deux photons. La durée de vie est de l'ordre de 0,1 seconde.

2. Absorption (et émission induite) multiphotonique entre deux états atomiques discrets

Un atome soumis à un rayonnement suffisamment intense peut absorber *plusieurs* photons incidents et passer d'un niveau discret a à un autre niveau discret b , situé plus haut en énergie, à une distance égale à la somme des énergies des photons absorbés. Un tel processus est appelé absorption multiphotonique, le processus inverse étant l'émission induite multiphotonique. La figure 24 représente par exemple les deux amplitudes associées à une absorption à deux photons entre deux états discrets a et b .

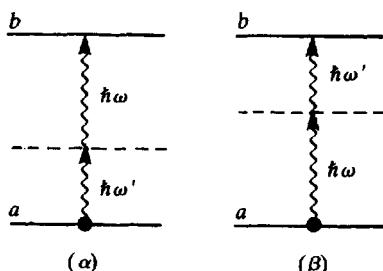


Figure 24. Absorption à deux photons entre deux états discrets.

Les processus d'absorption multiphotonique peuvent apparaître sur un grand nombre de systèmes atomiques ou moléculaires, dans tous les domaines de fréquence (hertzienne, micro-onde, infrarouge, optique...). Les photons qui sont absorbés au cours du processus multiphotonique peuvent avoir des fréquences égales ou différentes (ces fréquences peuvent être même très différentes, comme par exemple dans les transitions multiphotoniques faisant intervenir simultanément des photons optiques et hertziens).

(*) L'écart entre $2s_{\frac{1}{2}}$ et $2p_{\frac{1}{2}}$ (déplacement de Lamb) est très faible (de l'ordre de 1000 MHz), et l'émission spontanée est négligeable dans ce domaine de fréquences (elle varie en ω^3). Voir la discussion des divers processus de désexcitation de l'état $2s$ dans Bethe et Salpeter, Sect. 67.

Comme nous l'avons déjà mentionné plus haut, l'impulsion totale et le moment cinétique total doivent être conservés à l'issue du processus. De telles lois de conservation (jointes à la conservation de la parité) permettent de comprendre simplement plusieurs propriétés importantes des transitions multiphotoniques. Deux exemples simples sont analysés dans les remarques qui suivent.

Remarques

(i) Comme premier exemple d'application des lois de conservation, considérons un processus d'absorption à deux photons, de même fréquence ω , et de vecteurs d'onde opposés $+k$ et $-k$, donc d'impulsions opposées $+\hbar k$ et $-\hbar k$. Lorsque l'atome passe de l'état a à l'état b en absorbant ces deux photons d'impulsion globale nulle, son impulsion ne change pas, et donc également son énergie cinétique. Il s'ensuit que, au premier ordre en v/c , où v est la vitesse atomique, la condition de résonance (conservation de l'énergie globale) s'écrit

$$E_b - E_a = 2\hbar\omega \quad (\text{D.2})$$

Dans un processus d'absorption à deux photons de même fréquence et de directions de propagation opposées, il n'y a donc ni effet Doppler du premier ordre, ni effet de recul. On peut également comprendre l'origine de cet effet en passant du référentiel du laboratoire au référentiel au repos de l'atome. Dans ce référentiel au repos, les déplacements Doppler (du premier ordre) des deux photons, $+k.v$ et $-k.v$, sont opposés et se compensent exactement dans le bilan d'énergie de la transition. Toutes ces considérations se généralisent aisément à des transitions à plus de deux photons. Si la somme des vecteurs d'onde des photons absorbés au cours de la transition est nulle ($\sum_i k_i = 0$), tout effet Doppler du premier ordre

disparaît dans la condition de résonance (*).

(ii) Le deuxième exemple que nous considérons est relatif à un niveau atomique de moment cinétique $J = 1/2$, soumis à un champ magnétique statique B_0 , parallèle à $0z$, qui écarte les deux sous-niveaux Zeeman $m = -1/2$ et $m = +1/2$ d'une quantité $\hbar\omega_0$, proportionnelle à B_0 , et à un champ de radiofréquence $B_1 \cos \omega t$, de fréquence ω fixe et de polarisation linéaire perpendiculaire à B_0 . Lorsque le champ B_0 est balayé, des transitions résonnantes se produisent entre les deux sous-niveaux Zeeman quand l'écart $\hbar\omega_0$ entre ces sous-niveaux est égal à un nombre impair de fois $\hbar\omega$:

$$\omega_0 = (2n + 1)\omega \quad (\text{D.3})$$

Le caractère *impair* de ce spectre est une conséquence directe de la conservation du moment cinétique global. Le champ de radiofréquence

(*) Voir par exemple G. Grynberg et B. Cagnac, Rep. Prog. Phys. **40**, 791 (1977); V.S. Letokhov and V.P. Chebotayev, « Non-linear Laser Spectroscopy » chapitre 4, Springer Series in Optical Sciences Vol. 4, Springer Verlag (Berlin 1977).

peut en effet être décomposé en deux champs tournants, droit et gauche autour de Oz , auxquels sont associés des photons σ^+ et σ^- ayant respectivement un moment cinétique $+\hbar$ et $-\hbar$ par rapport à Oz . Or, pour passer du sous-niveau $m = -1/2$ au sous-niveau $m = +1/2$, l'atome a besoin d'augmenter son moment cinétique le long de Oz de $+\hbar$. Il ne peut le faire qu'en absorbant soit un photon σ^+ , soit deux photons σ^+ et un photon σ^- (figure 25) et plus généralement $n+1$ photons σ^+ et n photons σ^- . La conservation de l'énergie donne alors immédiatement la condition de résonance (D.3) (*).

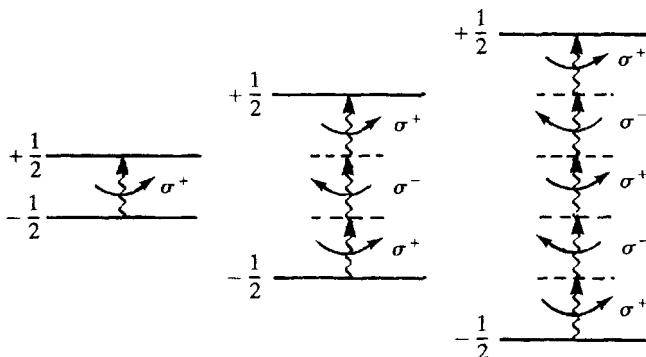


Figure 25. Résonances à un, trois, cinq photons pour un champ de radiofréquence polarisé linéairement et orthogonal au champ magnétique statique.

3. Ionisation multiphotonique

Des processus d'absorption multiphotoniques peuvent également faire passer un atome d'un niveau discret à un niveau du continuum. Par exemple, un atome, initialement dans l'état fondamental, peut être ionisé par un rayonnement laser de fréquence ω , même si l'énergie $\hbar\omega$ des photons incidents est inférieure à l'énergie d'ionisation E_I . En effet, en absorbant un nombre suffisamment élevé de photons, l'atome peut toujours acquérir l'énergie nécessaire pour parvenir dans le continuum d'ionisation (figure 26) (**). La probabilité d'ionisation multiphotonique croît de façon importante lorsqu'une étape intermédiaire de l'excitation fait intervenir une transition quasi résonnante entre niveaux discrets. Ainsi, dans le processus d'ionisation à trois photons de la figure 26, le niveau discret c a une énergie voisine de celle du niveau a augmentée de $2\hbar\omega$, et la transition à deux photons

(*) Pour l'étude des processus multiphotoniques dans le domaine des radiofréquences, voir : J.M. Winter, Ann. Phys. (Paris), 4, 745 (1959) ; Brossel ; Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, complément B_{XIII} .

(**) Pour une revue des travaux sur ces processus, voir par exemple : G. Mainfray et C. Manus, Multiphoton ionization of atoms, p. 7, (édité par S. Chin and P. Lambropoulos) Academic Press (New York 1984) ; Shen, chapitre 22.

$a \rightarrow c$ est quasi résonnante. L'état du système global atome dans l'état $a + 2$ photons (représenté par une ligne pointillée) est très voisin de l'état discret c .

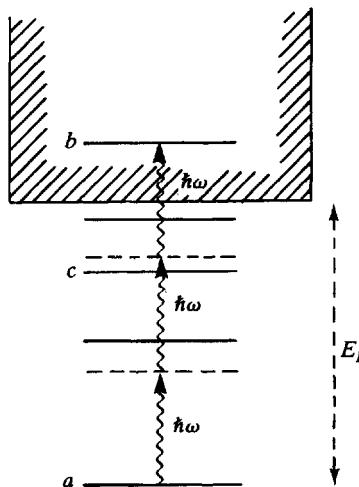


Figure 26. Ionisation d'un atome par absorption de trois photons (l'énergie de l'état a augmentée de $2\hbar\omega$ est quasi résonnante avec l'énergie de l'état discret c).

Remarques

(i) La variation en fonction de $(2\omega - \omega_{ca})$ de la probabilité du processus de photoionisation de la figure 26 n'est généralement pas symétrique de part et d'autre de la fréquence de résonance ($2\omega = \omega_{ca}$). On peut en effet distinguer deux contributions à l'amplitude de transition vers le continuum : celle où le niveau intermédiaire atteint après absorption de deux photons diffère de c et celle où le niveau intermédiaire est c . La première contribution varie généralement peu quand $2\omega - \omega_{ca}$ varie autour de 0 alors que la seconde a un comportement résonnant et change de signe pour $2\omega = \omega_{ca}$. Selon le signe du désaccord ($2\omega - \omega_{ca}$), les deux contributions s'ajoutent ou se retranchent, ce qui explique la dissymétrie de la variation de la probabilité de photoionisation. En fait, nous retrouvons dans ce problème les profils de Fano considérés dans le complément C₁ (§ 3-d). En effet, le niveau $|a;N\text{ke}\rangle$ est, d'une part couplé directement au continuum $|b;(N-3)\text{ke}\rangle$ via les termes non résonnantes, et d'autre part au niveau discret $|c;(N-2)\text{ke}\rangle$ qui est lui-même couplé au continuum.

(ii) La probabilité d'ionisation multiphotonique dépend aussi de l'état du rayonnement. Considérons, à titre d'exemple, un processus d'ionisation à deux photons obtenu, soit avec un champ monochromatique dans l'état $|N\text{ke}\rangle$, soit avec un état $|N_1\mathbf{k}_1\epsilon_1; N_2\mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$ où deux modes du champ sont remplis. Les vecteurs d'onde \mathbf{k} , \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont supposés suffisamment voisins pour que les éléments de matrice atomiques intervenant dans l'amplitude

de transition soient les mêmes queles que soient les photons absorbés. Dans le cas où l'état initial est $|a;N\mathbf{k}\epsilon\rangle$, l'amplitude de transition vers le continuum est proportionnelle à $\sqrt{N(N-1)} = N$ (nous supposons $N, N_1, N_2 \gg 1$) et la probabilité de transition varie comme N^2 . Dans le cas où l'état initial est $|a;N_1\mathbf{k}_1\epsilon_1, N_2\mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$, la probabilité d'absorber deux photons du mode $\mathbf{k}_1\epsilon_1$ est proportionnelle à N_1^2 et celle d'absorber deux photons du mode $\mathbf{k}_2\epsilon_2$ proportionnelle à N_2^2 . Considérons à présent l'amplitude de transition associée à l'absorption d'un photon dans chaque mode. Il faut ajouter la contribution des deux ordres possibles d'absorption « $\mathbf{k}_1\epsilon_1$ puis $\mathbf{k}_2\epsilon_2$ » et « $\mathbf{k}_2\epsilon_2$ puis $\mathbf{k}_1\epsilon_1$ », conduisant à une transition vers le même état final $|b;(N_1-1)\mathbf{k}_1\epsilon_1, (N_2-1)\mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$. L'amplitude de transition est donc proportionnelle à $2\sqrt{N_1N_2}$ et la probabilité de transition à $4N_1N_2$. En définitive, la probabilité d'ionisation à partir de l'état $|a;N_1\mathbf{k}_1\epsilon_1, N_2\mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$ est proportionnelle à $N_1^2 + N_2^2 + 4N_1N_2$ qui est toujours plus grande que $(N_1 + N_2)^2$. Pour une même énergie du rayonnement incident, l'ionisation multiphotonique est donc plus efficace lorsque les photons sont répartis sur plusieurs modes du champ.

4. Génération d'harmoniques

Un atome ou une molécule, partant d'un état discret a , par exemple l'état fondamental, peut absorber plusieurs photons $\hbar\omega$, en nombre p , puis revenir à l'état a en émettant un seul photon d'énergie $p\hbar\omega$. La figure 27 représente un tel processus pour $p = 3$ (appelé « génération d'harmonique 3 »). Là encore, des quasi-résonances intermédiaires peuvent augmenter l'efficacité d'un tel processus.

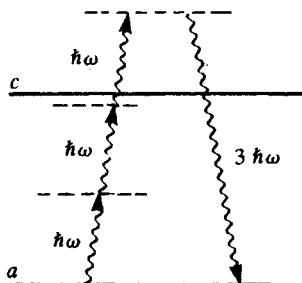


Figure 27. Génération d'harmonique 3
(avec quasi-résonance sur le niveau discret c).

Remarque

La génération d'un champ harmonique peut être également considérée comme un processus de diffusion avec absorption de p photons $\mathbf{k}\epsilon$ et émission d'un photon $\mathbf{k}'\epsilon'$, la conservation de l'énergie entraînant que $\omega' = p\omega$.

Analysons maintenant les contributions de deux atomes A et B à un tel processus. Nous supposons que ces atomes sont initialement dans l'état fondamental a et que leurs centres de masse ont pour impulsion

$\hbar\mathbf{K}_A$ et $\hbar\mathbf{K}_B$. L'état initial du rayonnement correspond à N photons dans le mode $\mathbf{k}\epsilon$ et 0 photon dans le mode $\mathbf{k}'\epsilon'$, de sorte que pour le système global photons + atomes, l'état initial est :

$$|\varphi_i\rangle = |N\mathbf{k}\epsilon, 0\mathbf{k}'\epsilon'\rangle \otimes |a, \mathbf{K}_A\rangle \otimes |b, \mathbf{K}_B\rangle$$

Si la création du photon harmonique résulte de l'interaction avec l'atome A , l'état final du processus est :

$$|\varphi_f\rangle = |(N-p)\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon'\rangle \otimes |a, \mathbf{K}_A + \delta\mathbf{k}\rangle \otimes |b, \mathbf{K}_B\rangle$$

où $\hbar\delta\mathbf{k} = \hbar(p\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ représente la modification de l'impulsion de l'atome A résultant de la conservation de l'impulsion globale du système atomes + champ. Si, en revanche, l'émission du photon harmonique résulte de l'interaction avec l'atome B , c'est ce dernier qui subit l'effet de recul et l'état final du processus est

$$|\varphi'_f\rangle = |(N-p)\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon'\rangle \otimes |a, \mathbf{K}_A\rangle \otimes |b, \mathbf{K}_B + \delta\mathbf{k}\rangle$$

Lorsque $\delta\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$, les deux états finals $|\varphi_f\rangle$ et $|\varphi'_f\rangle$ sont différents, de sorte que la probabilité d'émission d'un photon harmonique est la somme des probabilités obtenues pour chaque atome. En revanche, lorsque $\delta\mathbf{k} = \mathbf{0}$, l'état final du processus est le même que l'atome diffuseur soit A ou B : il n'est pas possible alors de préciser quel atome a émis le photon harmonique. Pour trouver la probabilité d'émission, il faut additionner les amplitudes de diffusion par chaque atome avant d'élever la somme au carré. Si les amplitudes de diffusion sont en phase, il en résulte une probabilité d'émission double dans la direction pour laquelle $\delta\mathbf{k} = \mathbf{0}$ qui n'est autre que $\mathbf{k}' = p\mathbf{k}$, c'est-à-dire la direction avant.

Le raisonnement précédent peut être étendu à un nombre quelconque N_a d'atomes. L'émission de l'onde harmonique dans la direction $\mathbf{k}' = p\mathbf{k}$ résulte de la contribution cohérente des divers atomes et croît comme N_a^2 alors que l'émission dans les autres directions augmente linéairement avec N_a . La situation ainsi obtenue est caractéristique des problèmes de diffusion vers l'avant.

Précisons pour finir que l'analyse précédente ne s'applique qu'à des milieux dilués, dont les dimensions sont de plus suffisamment petites pour que les effets d'indice puissent être négligés. Si tel n'est pas le cas, les photons incidents aussi bien que les photons diffusés peuvent interagir plusieurs fois avec les atomes du milieu, ce qui modifie leur propagation. Les vitesses de phase de l'onde incidente et de l'onde harmonique ne sont plus alors forcément égales. Au cours de la propagation, un déphasage peut donc apparaître entre les deux ondes, conduisant à une interférence destructive entre les contributions de plans d'atomes successifs. Pour obtenir une émission cohérente de l'onde harmonique aussi intense que possible, il faut donc réaliser une condition d'accord de vitesse de phase entre l'onde incidente et l'onde harmonique (« phase matching ») (*).

(*) Pour plus de précision sur les problèmes de génération d'ondes harmoniques et de mélange de fréquences voir Bloembergen § 5-6, Shen chapitres 6, 7 et 8, Hanna, Yuratich and Cotter chapitre 4 et références incluses.

5. Processus multiphotoniques et diffusion quasi résonnante

L'exemple précédent peut être considéré comme une diffusion multiphotonique dans la mesure où des photons disparaissent et d'autres apparaissent (toutes les flèches ne sont pas dans le même sens, montant ou descendant). Un autre exemple d'une telle situation est l'excitation résonnante d'un niveau b situé à une distance $\hbar\omega_0$ au dessus du niveau de départ a , excitation qui peut apparaître à haute intensité, même si la fréquence ω du rayonnement incident n'est pas tout à fait égale à ω_0 . L'atome, partant de a , absorbe un photon incident $\hbar\omega$, émet spontanément (*) un photon $\hbar\omega'$, puis absorbe un deuxième photon incident $\hbar\omega$ pour finir dans le niveau b (figure 28).

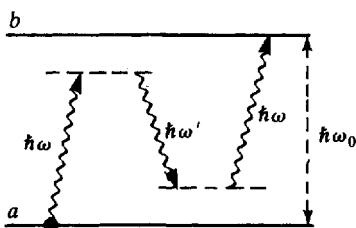


Figure 28. Processus à trois photons permettant d'exciter le niveau b , même si les photons incidents n'ont pas tout à fait la bonne énergie ($\omega \neq \omega_0$).

La conservation de l'énergie donne

$$\hbar\omega_0 = E_b - E_a = \hbar\omega - \hbar\omega' + \hbar\omega \quad (\text{D.4})$$

c'est-à-dire encore

$$\omega' = 2\omega - \omega_0 \quad (\text{D.5})$$

Comme les deux états intermédiaires sont quasirésonnantes (si $\omega_0 - \omega$ n'est pas trop grand), la probabilité d'un tel processus est suffisamment grande pour qu'il puisse être observé.

En fait, nous avons vu dans le paragraphe B-4 ci-dessus que l'arrivée dans un état excité n'est jamais en fait le véritable état final d'un processus physique, puisque cet état excité peut toujours se désintégrer par émission spontanée. En plus du processus de diffusion quasirésonnante à l'ordre le plus bas en champ incident (figure 29α), nous sommes donc conduits tout naturellement à considérer maintenant le processus de diffusion d'ordre 2 en champ incident (figure 29β), où l'atome

(*) Si un rayonnement est déjà présent à la fréquence ω' ; le processus de la figure 28 permet de l'amplifier par émission induite (voir par exemple F.Y. Wu, S. Ezekiel, M. Ducloy and B.R. Mollow, Phys. Rev. Lett. **38**, 1077 (1977)).

absorbe un photon $\hbar\omega$, émet un photon $\hbar\omega'$, absorbe un deuxième photon $\hbar\omega$ et émet enfin un photon $\hbar\omega''$ pour finir en a .

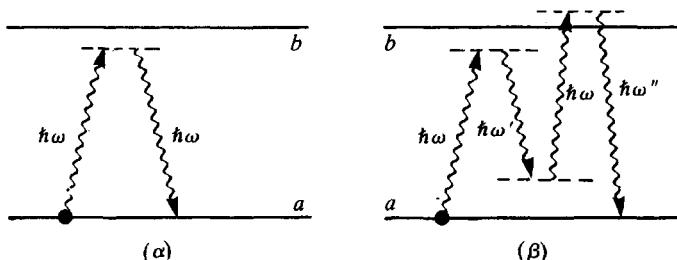


Figure 29. Processus de diffusion quasi résonnante, d'ordre un en champ incident (α), et d'ordre 2 (β).

Alors que la conservation de l'énergie impose pour le processus α que le photon diffusé ait la même fréquence que le photon incident (comme pour la diffusion Rayleigh), pour le processus β , on doit seulement avoir

$$2\omega = \omega' + \omega'' \quad (\text{D.6})$$

ω' et ω'' pouvant par ailleurs varier de manière continue. Ainsi, à haute intensité, la lumière diffusée par un atome excité au voisinage de la résonance n'est plus nécessairement monochromatique. En fait, l'amplitude associée au processus β varie de manière résonnante quand l'énergie atteinte après absorption du deuxième photon $\hbar\omega$ (3ème ligne pointillée de la figure 29) varie autour de l'énergie de l'état b , dans un intervalle de largeur $\hbar\Gamma$. Il s'ensuit que ω'' est repartie sur un intervalle de largeur Γ autour de ω_0 , et par suite, ω' dans un intervalle symétrique par rapport à ω , donc centré en $2\omega - \omega_0$ (figure 30). La figure 30 a été dessinée en supposant $|\omega - \omega_0| > \Gamma$. Si ce n'est pas le cas, et si de plus l'intensité incidente est telle que la fréquence de Rabi associée à l'excitation est grande devant Γ , l'approche perturbative précédente n'est plus valable car elle ne converge pas. Nous verrons dans les chapitres V et VI plus loin comment d'autres approches (par exemple, celle de l'atome habillé) permettent alors de comprendre les propriétés essentielles de la lumière diffusée.

Remarque

Dans le processus schématisé sur la figure 29 β , les photons de fréquence ω' et $\omega'' = 2\omega - \omega'$ sont fortement corrélés puisque l'émission d'un photon ω' s'accompagne forcément de l'émission d'un photon de fréquence $2\omega - \omega'$ pour conserver l'énergie à l'issue du processus. De surcroît, pour un ensemble de N atomes ($N \gg 1$), l'émission d'une telle

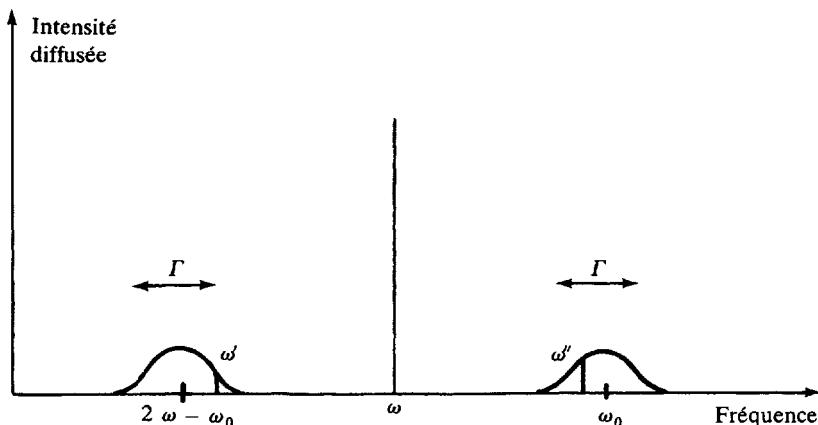


Figure 30. Spectre de la lumière diffusée par un atome excité au voisinage de la résonance. La raie centrale monochromatique et les deux raies latérales de largeur Γ correspondent respectivement aux processus α et β de la figure 29.

paire de photons se fait préférentiellement dans des directions \mathbf{k}' et \mathbf{k}'' satisfaisant la relation d'accord de phase $2\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{k}''$. En effet, lorsque les photons sont émis dans ces directions, l'impulsion de l'atome ne change pas à l'issue du processus, et ce sont les amplitudes de transition relatives aux divers atomes qui s'ajoutent et non les probabilités (voir remarque du paragraphe D-4). L'émission des deux photons dans deux directions vérifiant la condition d'accord de phase est donc N fois plus probable que l'émission dans deux directions quelconques.

Expérimentalement, on utilise souvent une onde stationnaire de fréquence ω . Dans ce cas, l'absorption de deux photons se propageant en sens inverse dans cette onde conduit à la condition d'accord de phase $\mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = 0$. Les deux photons corrélés sont alors émis dans des directions opposées (*).

(*) Voir par exemple P. Grangier, G. Roger, A. Aspect, A. Heidmann et S. Reynaud, Phys. Rev. Lett. 57, 687 (1986).

**E - CORRECTIONS RADIATIVES :
DES PHOTONS SONT ÉMIS ET RÉABSORBÉS
(OU ABSORBÉS ET RÉÉMIS)**

Dans tous les exemples considérés plus haut, l'état du rayonnement est modifié entre l'état initial et l'état final du processus étudié. Même dans le processus de diffusion, où le nombre de photons reste inchangé, la direction du photon diffusé est en général différente de celle du photon incident (sauf pour la diffusion vers l'avant). Nous considérons maintenant des processus où l'état du rayonnement est le même dans l'état final et dans l'état initial, tout en changeant bien sûr dans l'état intermédiaire.

1. Corrections radiatives spontanées

a) CAS D'UN ÉLECTRON LIBRE : CORRECTION DE MASSE

Commençons par le cas le plus simple possible, celui d'un électron libre d'impulsion \mathbf{p} , initialement dans le vide de rayonnement $|0\rangle$. L'état initial est donc

$$|\varphi_i\rangle = |\mathbf{p};0\rangle \quad (\text{E.1})$$

Cet électron peut toujours émettre un photon $\mathbf{k}\epsilon$, son impulsion changeant de \mathbf{p} à $\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}$ (figure 31α). Mais, comme nous l'avons déjà mentionné plus haut (§ A-3), le nouvel état ainsi obtenu, $|\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}; \mathbf{k}\epsilon\rangle$, ne peut jamais avoir la même énergie que l'état initial $|\mathbf{p}, 0\rangle$ de sorte qu'il ne peut pas être l'état final d'un processus réel conservant l'impulsion et l'énergie globales. Par contre, l'électron peut toujours réabsorber le photon émis et aboutir ainsi dans un état final qui coïncide exactement avec l'état initial (figure 31α). Ainsi, si un électron libre ne peut pas émettre réellement un photon, il peut toujours l'émettre et le réabsorber, de manière virtuelle comme on dit parfois, pour bien préciser que l'émission du photon ne peut être que transitoire. Le processus de la figure 31α est d'ordre 2 en H_{I1} , donc d'ordre 2 vis à vis de la charge q . Au même ordre q^2 , il faut également tenir compte de l'effet de H_{I2} à l'ordre 1. Le terme en $a_{\mathbf{k}\epsilon} a_{\mathbf{k}\epsilon}^+$ de H_{I2} peut en effet créer et détruire simultanément un photon $\mathbf{k}\epsilon$, l'électron restant dans le même état \mathbf{p} (figure 31β).

Dans le sous espace d'impulsion globale \mathbf{p} , l'état initial $|\varphi_i\rangle = |\mathbf{p};0\rangle$ des processus 31α et 31β est un état discret. Comme il n'est couplé à aucun autre état de même énergie par l'hamiltonien d'interaction, il est relativement bien isolé des autres états non perturbés de H_0 et l'amplitude $\langle \varphi_i | \hat{U}(T) | \varphi_i \rangle$, dont la figure 31 représente les termes

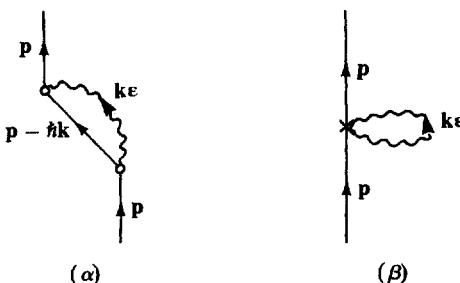


Figure 31. Processus d'ordre 2 en q pouvant se produire pour un électron libre d'impulsion p , dans le vide de rayonnement.

d'ordre les plus bas en q , doit alors permettre de déterminer le déplacement δE de l'état $|\mathbf{p};0\rangle$ dû au couplage entre l'électron et le rayonnement transverse (voir § B-1 du chapitre I). En fait, les déplacements associés aux processus 31 α et 31 β valent respectivement

$$\delta E_\alpha = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | \mathbf{p}; 0 \rangle|^2}{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega} \quad (\text{E.2})$$

$$\delta E_\beta = \langle \mathbf{p}; 0 | H_{I2} | \mathbf{p}; 0 \rangle \quad (\text{E.3})$$

et ne sont autres que les déplacements de l'état $|\mathbf{p};0\rangle$, au second ordre en H_{I1} et au premier ordre en H_{I2} , de la théorie habituelle des perturbations stationnaires.

Le dénominateur de (E.2) étant toujours négatif, le déplacement δE_α est négatif. A l'ordre le plus bas en $1/c^2$ (nous faisons un calcul non relativiste), le terme $-\hbar\omega$ est le terme prépondérant dans le dénominateur. Par ailleurs, comme $H_{I1} = -q\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}/m$ est proportionnel à l'opérateur \mathbf{p} , et que $|\mathbf{p};0\rangle$ est un vecteur propre de cet opérateur, le numérateur de (E.2) est proportionnel à \mathbf{p}^2 . Finalement, δE_α peut se mettre sous la forme

$$\delta E_\alpha = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \frac{\delta m}{m} \quad (\text{E.4})$$

où δm est une constante donnée par la formule (32) du complément B_{II} . Le processus 31 α décrit donc une diminution de l'énergie cinétique de l'électron due à une augmentation de sa masse qui passe de m à $m + \delta m$ (d'après (E.4), δE_α est en effet le terme d'ordre 1 dans le développement de $\mathbf{p}^2/2(m + \delta m)$ en puissances de $\delta m/m$). L'origine physique de cet effet est discutée dans le complément B_{II} . L'électron, de vitesse \mathbf{p}/m , crée un champ transverse proportionnel à cette vitesse, qui lui est lié, et qu'il entraîne avec lui (on

peut dire encore qu'il se déplace entouré d'un nuage de « photons virtuels »). L'énergie δE_α est la somme de l'énergie du champ transverse lié à l'électron (qui est positive), et de l'énergie de couplage de l'électron avec ce champ transverse (qui est négative et plus grande en valeur absolue).

L'expression (E.3) se calcule aisément à partir de l'expression de H_{I2} et du développement de \mathbf{A} en modes. On trouve

$$\delta E_\beta = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{q^2 \mathcal{A}_\omega^2}{2m} = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{q^2 \mathcal{E}_\omega^2}{2m\omega^2} \quad (\text{E.5})$$

expression qui représente l'énergie cinétique de vibration de l'électron dans les fluctuations du vide puisque \mathcal{E}_ω^2 n'est autre que la contribution du mode $\mathbf{k}\epsilon$ à $\langle 0 | \mathbf{E}_1^2 | 0 \rangle$. A cette énergie δE_β est associée une autre correction de masse $\delta m' = \delta E_\beta / c^2$ qui vient s'ajouter à la correction apparaissant dans (E.4). En poursuivant le calcul à des ordres supérieurs en $1/c^2$, on trouverait d'ailleurs un terme analogue à (E.4) avec $\delta m'$ au numérateur. Finalement les processus 31 α et 31 β sont responsables d'une correction de masse de l'électron.

Remarques

- (i) Le champ transverse associé aux photons virtuels de la figure 31 peut être considéré en première approximation comme lié à l'électron. Un autre point de vue pour étudier les corrections radiatives consiste à effectuer sur l'hamiltonien de l'électrodynamique quantique une transformation unitaire (transformation de Pauli-Fierz) visant à soustraire du champ total ce champ transverse lié. Les corrections radiatives à l'ordre le plus bas apparaissent alors directement dans l'hamiltonien des particules. Un tel point de vue est exposé dans le complément B_{II} .
- (ii) Les expressions (E.2) et (E.5), qui résultent d'un traitement non relativiste de l'électron, sont certainement incorrectes en ce qui concerne les contributions des modes $\mathbf{k}\epsilon$ relativistes ($\hbar\omega$ de l'ordre de mc^2 ou supérieur à mc^2). En effet, l'état intermédiaire, $\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}$, de l'électron dans le processus 31 α peut être relativiste pour $\hbar\omega$ suffisamment grand, même si les états initial (et final) ne le sont pas (nous supposons $p/mc \ll 1$). De plus, nous n'avons pas envisagé ici la possibilité d'apparition de paires électron-positron dans l'état intermédiaire. En fait, le calcul complètement relativiste conduit à des parties haute fréquence différentes de celles des sommes (E.2) et (E.5) et donne, pour la correction de masse totale δm , une intégrale sur ω qui diverge logarithmiquement (alors que les intégrales (E.2) et (E.5) divergent linéairement et quadratiquement). Nous n'aborderons pas ici les problèmes liés à l'apparition d'expressions divergentes dans le calcul des corrections radiatives, ni la manière dont on résout ces difficultés (renormalisation de la masse et de la charge de l'électron).

b) CAS D'UN ÉLECTRON ATOMIQUE : LARGEUR NATURELLE ET DÉPLACEMENT RADIATIF

Considérons maintenant le cas d'un électron lié, par exemple un électron atomique lié à un noyau par l'interaction de Coulomb. Des processus tout à fait analogues à ceux de la figure 31 peuvent être considérés. Par exemple, un atome, initialement dans l'état discret b (*), peut émettre un photon $k\epsilon$ et passer dans un autre état a , puis réabsorber le photon $k\epsilon$ et revenir dans l'état b (figure 32.α). La sommation sur l'état intermédiaire doit porter maintenant, non seulement sur tous les photons $k\epsilon$, mais aussi sur tous les états atomiques internes a . De même, le processus 32β généralise directement 31β

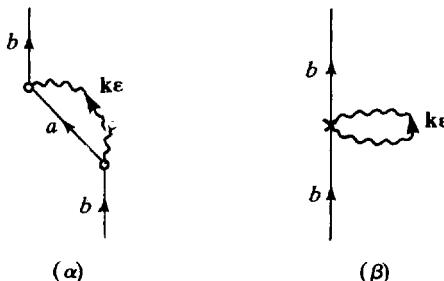


Figure 32. Emission et réabsorption d'un photon par un atome initialement dans l'état interne b .

La différence essentielle entre les processus 32α et 31α est que, lorsque b est un état atomique excité, il peut apparaître des états intermédiaires $|a;k\epsilon\rangle$ ayant même énergie que l'état initial $|b;0\rangle$, et qui pourraient donc être les états finals d'un processus réel. Une telle situation se produit lorsque b peut se désintégrer radiativement par émission spontanée vers un état a d'énergie $E_a < E_b$ (voir § A-1). En d'autres termes, la transition vers l'état intermédiaire de la figure 32α n'est pas toujours virtuelle comme pour 31α . Elle peut être également réelle.

Mathématiquement, la possibilité de transitions réelles à partir de l'état initial $|\varphi_i\rangle = |b;0\rangle$ se traduit par le fait que l'amplitude

(*) Pour simplifier, nous n'écrivons pas les nombres quantiques externes qui, dans le système du centre de masse, valent $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ dans les états initial et final, $\mathbf{K}' = -\mathbf{k}$ dans l'état intermédiaire.

$\langle \varphi_i | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle$ pour que le système soit resté dans le même état après un temps T est maintenant une exponentielle, non plus seulement oscillante, mais également amortie

$$\langle \varphi_i | \tilde{U}(T) | \varphi_i \rangle = e^{-i(\Delta - i\frac{\Gamma}{2})T} \quad (\text{E.6})$$

Les diagrammes de la figure 32 permettent de calculer Γ et δE à l'ordre le plus bas en q . Γ est la probabilité par unité de temps de quitter l'état b vers un niveau de moindre énergie par émission spontanée réelle d'un photon. L'expression de Γ a déjà été donnée plus haut (voir (A.5)). $\hbar\Delta$ est un déplacement de l'état b , généralisant (E.2) et (E.3)

$$\hbar\Delta = \hbar\Delta_1 + \hbar\Delta_2 \quad (\text{E.7})$$

$$\hbar\Delta_1 = \mathcal{P} \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle b;0 | H_{I1} | a;\mathbf{k}\epsilon \rangle|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega} \quad (\text{E.8})$$

$$\hbar\Delta_2 = \langle b;0 | H_{I2} | b;0 \rangle \quad (\text{E.9})$$

\mathcal{P} signifie partie principale dans (E.8). Ainsi, pour un état atomique excité, les corrections radiatives spontanées se traduisent par un déplacement et un élargissement radiatifs, apparaissant comme les parties réelle et imaginaire d'une correction complexe à l'énergie. Pour l'état fondamental, seul subsiste le déplacement radiatif car aucun processus réel d'émission spontanée ne peut se produire à partir de l'état fondamental.

Revenons à l'expression (E.7) du déplacement $\hbar\Delta$. Il est facile de voir que (E.9) coïncide avec (E.5) à l'approximation des grandes longueurs d'ondes et représente donc l'énergie cinétique de vibration de l'électron dans les fluctuations du vide. Quant à $\hbar\Delta_1$, il est possible pour la partie haute fréquence de la somme sur ω ($\hbar\omega$ grand devant $|E_b - E_a|$, mais petit devant mc^2 pour que l'expression non relativiste (E.8) soit valable), de faire un développement de $(E_b - E_a - \hbar\omega)^{-1}$ en puissances de $(E_b - E_a)/\hbar\omega$. L'approximation d'ordre zéro revient à négliger $E_b - E_a$ au dénominateur de (E.8) : on peut montrer (voir exercice 7) qu'elle donne la contribution, au déplacement $\hbar\Delta_1$ de l'état b , de la variation d'énergie cinétique de l'électron due à la correction de masse δm introduite précédemment pour un électron libre. Le terme suivant, d'ordre 1 en $(E_b - E_a)/\hbar\omega$, est lié à une correction de l'énergie potentielle $V(r)$, proportionnelle au laplacien $\Delta V(r)$ de $V(r)$. Pour un potentiel coulombien ($V(r) \sim 1/r$), cette correction, qui est proportionnelle à $\delta(r)$, affecte donc surtout les états s et lève la dégénérescence entre les états $2s_{\frac{1}{2}}$ et $2p_{\frac{1}{2}}$ de l'atome d'hydrogène, prévue par l'équation de Dirac (déplacement de Lamb). Physiquement, cette correction à V , proportionnelle à ΔV , peut être interprétée comme due à un moyennage du potentiel « vu » par l'électron dans son mouvement de

vibration sous l'effet des fluctuations du vide (voir le complément B_{II} et l'exercice 7).

Remarque

Il est possible également de considérer les niveaux d'énergie d'un électron dans un champ magnétique statique uniforme, et de calculer les déplacements radiatifs de ces niveaux, comme nous l'avons fait plus haut pour les niveaux d'un électron atomique. On trouve alors que les fréquences ω_c du mouvement cyclotron de la charge, et ω_L du mouvement de précession de Larmor du spin sont toutes deux diminuées, ω_c étant plus diminuée que ω_L . Le facteur g du moment magnétique de spin de l'électron, qui peut être défini comme égal au rapport $2\omega_L/\omega_c$, est donc augmenté par les corrections radiatives, par rapport à la valeur 2 prévue, en l'absence de corrections radiatives, par l'équation de Dirac (anomalie $g - 2$) (voir exercices 10 et 12).

2. Corrections radiatives stimulées

Dans le paragraphe précédent, l'état du rayonnement est le vide $|0\rangle$ dans l'état initial et dans l'état final. Nous allons supposer maintenant que plusieurs photons incidents sont présents initialement, et nous allons étudier des processus où un atome *absorbe* l'un de ces photons puis le réémet (figure 33 α), ou émet de manière stimulée un photon identique à l'un des photons incidents et le réabsorbe (figure 33 β), pour aboutir dans les deux cas dans un état atomique final a identique à l'état initial. L'état atomique intermédiaire b est quelconque.

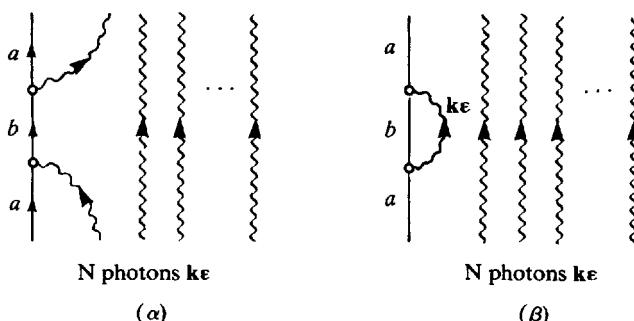


Figure 33. - α Absorption et réémission d'un photon incident
- β Emission induite d'un photon $k\epsilon$ identique à un photon incident et réabsorption de ce photon.

Au même ordre q^2 , il faut également tenir compte de l'effet de H_{I2} au premier ordre, qui peut être symbolisé par les diagrammes de la figure 34.

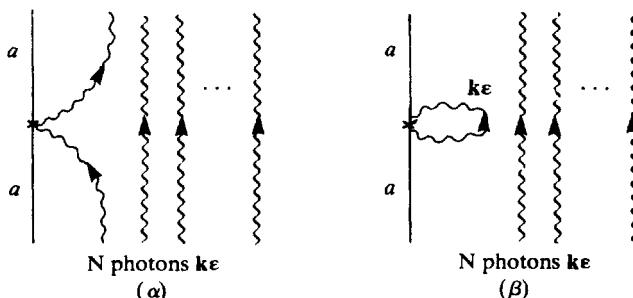


Figure 34. Diagrammes schématisant l'effet de H_{I2} à l'ordre 1.

- α : termes en $a^+ a$;
- β : termes en aa^+ .

Dans de nombreux cas, l'amplitude de probabilité, $\langle \varphi'_i | \tilde{U}(T) | \varphi'_i \rangle$, pour que le système soit resté après un temps T dans le même état $|\varphi'_i\rangle = |\alpha; N\mathbf{k}\epsilon\rangle$ est, à une très bonne approximation, une exponentielle oscillante et amortie, comme en (E.6).

$$\langle \varphi'_i | \tilde{U}(T) | \varphi'_i \rangle = e^{-i(\Delta' - i\frac{\Gamma'}{2})T} \quad (\text{E.10})$$

C'est par exemple le cas si le rayonnement incident est monochromatique, mais peu intense, ou suffisamment loin de la résonance, ou au contraire à large bande spectrale (voir discussion du paragraphe B-4 ci-dessus). Quelle est dans ce cas la signification physique des paramètres Γ' et Δ' apparaissant dans l'amplitude (E.10) ?

Le taux d'amortissement Γ' de l'état $|\varphi'_i\rangle$ représente la probabilité par unité de temps qu'a le système global de quitter l'état $|\varphi'_i\rangle$. On peut dire encore que Γ' est la probabilité par unité de temps qu'a l'atome dans l'état a d'absorber un photon incident, ou d'émettre de manière stimulée un photon identique à l'un des photons incidents. Comme l'état intermédiaire des figures 33 peut ne pas être résonnant et qu'il sert alors uniquement de relais dans un processus de diffusion, il est plus correct en fait de considérer que Γ' est la probabilité par unité de temps qu'un photon incident quelconque soit diffusé, grandeur physique directement reliée à la section efficace totale de diffusion (*).

(*) Le fait que les amplitudes associées aux processus des figures 33 et 34 permettent de calculer un taux Γ' simplement relié à la section efficace totale de diffusion n'est pas surprenant. En effet, les processus des figures 33 et 34 sont des processus de *diffusion vers l'avant*, et il est bien connu qu'il y a une relation entre la section efficace totale de diffusion et la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant (relation de Bohr-Peierls-Placzek, voir par exemple Messiah, p. 744).

L'effet physique associé au taux d'amortissement Γ' peut être envisagé, soit du point de vue de l'atome, soit du point de vue du champ. Du point de vue de l'atome, Γ' apparaît comme un *élargissement radiatif* du niveau a causé par les photons incidents. En d'autres termes, Γ' est l'analogue, pour les processus d'absorption et d'émission induite, de la largeur naturelle Γ qui est associée aux processus d'émission spontanée. A la différence de Γ , qui est une grandeur « intrinsèque », Γ' dépend des caractéristiques du faisceau incident (intensité, direction, polarisation, répartition spectrale...). De plus, à la différence de Γ , Γ' peut être non nul pour l'état fondamental (il n'y a pas de processus réels d'émission spontanée à partir de l'état fondamental, alors qu'il peut y avoir des processus réels d'absorption, et plus généralement de diffusion). En ce qui concerne le champ, Γ' est associé à l'atténuation du faisceau incident par absorption, ou à son amplification par émission induite. En effet, les processus des figures 33 et 34 sont des processus de diffusion vers l'avant, ce qui rappelle le point de vue classique où l'atténuation (ou l'amplification) d'un champ incident est reliée à l'interférence entre le champ incident et le champ diffusé vers l'avant.

Considérons maintenant l'autre paramètre $\hbar\Delta'$ apparaissant dans (E.10). Du point de vue de l'atome, $\hbar\Delta'$ peut être considéré comme un déplacement de l'état a dû aux photons incidents (déplacement lumineux). Un tel effet est appelé parfois « effet Stark dynamique » par analogie avec l'effet Stark ordinaire qui est associé à l'énergie de polarisation d'un atome dans un champ électrique statique. Dans le cas étudié ici, l'énergie $\hbar\Delta'$ peut être considérée comme l'énergie de polarisation de l'atome dans un champ électrique de fréquence non nulle, champ auquel l'atome « répond » avec sa polarisabilité « dynamique » et non statique. Le déplacement $\hbar\Delta'$ est l'équivalent pour l'absorption et l'émission induite du déplacement $\hbar\Delta$ lié à l'émission spontanée et étudié dans le paragraphe E-1-b plus haut. Comme la symétrie de l'excitation lumineuse intervient dans les propriétés de $\hbar\Delta'$, et que cette symétrie n'est plus la symétrie sphérique de l'émission spontanée (où l'atome interagit avec *tous* les modes), on conçoit que les déplacements lumineux des différents sous-niveaux Zeeman d'un atome puissent être différents (*). Pour le rayonnement, le champ diffusé vers l'avant est, en termes classiques, déphasé par rapport au champ incident, de sorte que le champ total résultant a non seulement

(*) C'est ainsi que les déplacements lumineux ont été observés pour la première fois sous forme d'une modification de l'écart entre sous-niveaux Zeeman de l'état fondamental d'un atome, produite par une irradiation lumineuse. Les raies de résonance magnétique dans l'état fondamental sont en effet très fines et des déplacements même très faibles peuvent être aisément détectés. Voir, par exemple, C. Cohen-Tannoudji et A. Kastler, *Progress in Optics*, Vol. V, p. 1 (édité par E. Wolf), North Holland (Amsterdam 1966).

une amplitude changée (c'est l'effet de Γ'), mais également une phase changée (c'est l'effet de Δ'). Un tel changement de phase, sommé sur tous les atomes d'un milieu, est à l'origine de l'indice de ce milieu.

Remarque

Pour ne pas allonger cet exposé, nous ne donnerons pas ici l'expression de Δ' . Disons simplement qu'elle se simplifie considérablement dans deux cas limites. Si l'excitation est quasi résonnante, c'est-à-dire si l'énergie des photons incidents est voisine de celle permettant de passer du niveau a à un autre niveau b , c'est alors le processus 33α qui est prépondérant, avec en plus un seul état atomique intermédiaire important, celui qui est quasi résonnant. L'autre cas limite simple correspond à une excitation haute fréquence, pour laquelle $\hbar\omega$ est grand devant toutes les énergies $(E_b - E_a)$. Un développement en puissances de $(E_b - E_a)/\hbar\omega$, analogue à celui que nous avons introduit plus haut à propos de (E.8), permet alors de montrer que $\hbar\Delta'$ peut être mis sous forme d'une somme de termes ayant chacun une interprétation physique très simple : énergie cinétique de vibration de l'électron dans l'onde incidente, variation de l'énergie potentielle due au moyennage des champs extérieurs par ce mouvement de vibration... La comparaison entre ces corrections radiatives induites par un champ incident et les corrections radiatives spontanées permet d'ailleurs d'identifier dans ces dernières la partie qui peut être attribuée aux fluctuations du vide (elles ont la même forme que les corrections radiatives qui seraient stimulées par un champ fluctuant de densité spectrale $\hbar\omega/2$ par mode), et la partie qui peut être attribuée à l'interaction de l'électron avec son propre champ (réaction de rayonnement) (*).

(*) Voir complément A_{IV} et J. Dupont-Roc, C. Fabre et C. Cohen-Tannoudji, J. Phys. B11, 563 (1978). β

F - INTERACTION PAR ÉCHANGE DE PHOTONS

Dans la partie E, nous avons considéré une situation où une même particule (ou un même groupe de particules) émet et réabsorbe virtuellement un photon. En présence de plusieurs particules (ou groupes de particules), le photon émis par l'une peut être réabsorbé par l'autre. La conservation de l'énergie entre l'état initial et l'état final porte alors globalement sur les deux systèmes, chacun d'eux pouvant être modifié. Il y a interaction entre les deux systèmes. Nous allons illustrer ce type de processus avec deux exemples.

1. Echange de photons transverses entre deux particules chargées : première correction à l'interaction de Coulomb

Soit deux particules chargées α et β , d'impulsions respectives \mathbf{p}_α et \mathbf{p}_β , en présence du vide de rayonnement. Prenons comme hamiltonien non perturbé H_0 celui des particules libres et du champ libre (point de vue décrit dans le paragraphe C-2 du chapitre I). L'hamiltonien d'interaction comprend alors l'interaction de Coulomb entre les deux particules et l'interaction avec le champ transverse. Avec les notations du paragraphe E-1-a, l'état initial s'écrit :

$$|\varphi_i\rangle = |\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta; 0\rangle \quad (\text{F.1})$$

Les processus affectant ces particules à l'ordre 2 vis à vis des charges électriques peuvent être divisés en deux classes. Nous retrouvons tout d'abord ceux décrits par les diagrammes de la figure 31, l'une des particules émettant et réabsorbant un photon alors que l'autre reste spectatrice. Ce sont les corrections radiatives propres de chacune des particules. De plus, nous avons l'interaction de Coulomb entre les deux particules (figure 35a) et l'échange de photons transverses (figures 35b et c).

Les diagrammes 35b et 35c décrivent un processus de diffusion où l'ensemble des deux particules passe de l'état $|\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta; 0\rangle$ à l'état $|\mathbf{p}'_\alpha, \mathbf{p}'_\beta; 0\rangle$ en échangeant un photon transverse. Dans l'espace des états du système global particules + photons, les diagrammes 35b et 35c traduisent l'existence d'un couplage indirect entre deux états appartenant à la multiplicité à 0 photon (états $|\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta; 0\rangle$ et $|\mathbf{p}'_\alpha, \mathbf{p}'_\beta; 0\rangle$) via un état intermédiaire appartenant à la multiplicité à un photon (qui est très éloigné de la précédente si $\hbar\omega$ est suffisamment grand). Un tel couplage indirect peut être également décrit par un « hamiltonien effectif » δV purement particulaire (c'est-à-dire n'agissant qu'à l'intérieur de la multiplicité à 0 photon), qui vient s'ajouter à V_{Coul} . D'après les résultats du complément B_I , les éléments de matrice de δV sont donnés

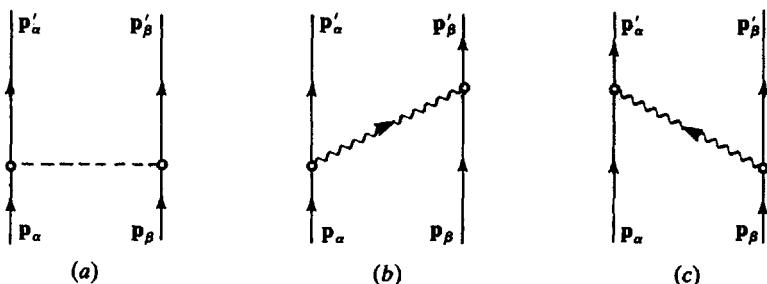


Figure 35. Interactions électromagnétiques entre deux particules chargées α et β

a - Interaction de Coulomb

b - Emission d'un photon transverse par α et réabsorption de ce photon par β

c - Emission d'un photon transverse par β et réabsorption de ce photon par α .

par l'expression

$$\langle \mathbf{p}'_\alpha, \mathbf{p}'_\beta | \delta V | \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta \rangle = \sum_{\mathbf{k}e} \sum_{\mathbf{p}'_\alpha \mathbf{p}'_\beta} \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_p - E_{p'} - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{p'} - E_{p''} - \hbar\omega} \right] \times \langle \mathbf{p}'_\alpha, \mathbf{p}'_\beta; 0 | H_{l1} | \mathbf{p}''_\alpha, \mathbf{p}''_\beta; \mathbf{k}e \rangle \langle \mathbf{p}''_\alpha, \mathbf{p}''_\beta; \mathbf{k}e | H_{l1} | \mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta; 0 \rangle \quad (\text{F.2})$$

Dans le second membre de (F.2), $E_p, E_{p'}, E_{p''}$ sont les énergies non perturbées des particules dans les états $|\mathbf{p}_\alpha, \mathbf{p}_\beta\rangle$, $|\mathbf{p}'_\alpha, \mathbf{p}'_\beta\rangle$, $|\mathbf{p}''_\alpha, \mathbf{p}''_\beta\rangle$. Pour $\hbar\omega$ suffisamment grand, on peut négliger $E_p - E_{p'}$ et $E_{p'} - E_{p''}$ dans les dénominateurs et ne garder que $\hbar\omega$. La sommation sur \mathbf{p}''_α et \mathbf{p}''_β fait apparaître alors une relation de fermeture, qui permet de donner une expression explicite pour δV :

$$\begin{aligned} \delta V &= - \sum_{\mathbf{k}e} \frac{1}{2\epsilon_0 L^3 \omega^2 m_\alpha m_\beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{m_\alpha m_\beta} (\mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_\alpha) (\mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_\beta) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)} + (\alpha \leftrightarrow \beta) \\ &= - \frac{q_\alpha q_\beta}{m_\alpha m_\beta \epsilon_0 c^2} \sum_{i,j=x,y,z} (\mathbf{p}_\alpha)_i (\mathbf{p}_\beta)_j S_{ij}(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \end{aligned} \quad (\text{F.3.a})$$

où

$$\begin{aligned} S_{ij}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}e} \epsilon_i \epsilon_j \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}}{k^2} \\ &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}}{k^2} \end{aligned} \quad (\text{F.3.b})$$

Pour passer de la première à la deuxième ligne de (F.3.b), on a utilisé la formule (54) du complément A_I et remplacé la somme discrète sur \mathbf{k} par une intégrale. La transformée de Fourier apparaissant dans (F.3.b) peut être calculée (*). On trouve

$$S_{ij}(\mathbf{p}) = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{\delta_{ij}}{\rho} + \frac{\rho_i \rho_j}{\rho^3} \right) \quad (\text{F.3.c})$$

Le report de (F.3.c) dans (F.3.a) donne finalement :

$$\begin{aligned} \delta V = & - \frac{q_\alpha q_\beta}{8\pi \epsilon_0 m_\alpha m_\beta c^2} \left\{ \mathbf{p}_\alpha \cdot \frac{1}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|} \mathbf{p}_\beta + \right. \\ & \left. + [\mathbf{p}_\alpha \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)] \frac{1}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|^3} [(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \cdot \mathbf{p}_\beta] \right\} \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

Nous voyons ainsi sur cet exemple comment l'effet de l'échange de photons entre deux systèmes peut être décrit, à une certaine approximation, par un hamiltonien effectif n'agissant que sur ces systèmes. Cet hamiltonien effectif peut être utilisé ensuite comme « hamiltonien d'interaction » en « oubliant » le champ qui propage cette interaction.

L'expression (F.4) décrit les premières corrections à l'interaction de Coulomb (**). Elle fait apparaître dans l'équation du mouvement des particules deux types de forces : d'une part, la force magnétique entre les courants associés aux déplacements des particules ; d'autre part, la correction en v^2/c^2 à la force de Coulomb, liée à la propagation de l'interaction réelle entre les deux particules.

Remarques

(i) Insistons sur le fait que δV est un hamiltonien effectif construit à partir de l'interaction réelle H_{II} . Il ne doit être utilisé que pour le calcul des énergies. On peut aussi le faire apparaître directement dans l'hamiltonien des particules en effectuant sur l'hamiltonien (C.1) du chapitre I une transformation unitaire.

(ii) Au lieu d'être éliminés pour faire apparaître l'interaction de Coulomb, la partie longitudinale du potentiel vecteur et le potentiel scalaire peuvent être quantifiés, ce qui donne naissance à des photons longitudinaux et scalaires. Dans ce cas, l'interaction de Coulomb elle-même est décrite comme un échange de photons longitudinaux et scalaires entre particules (***) .

(*) Pour faire un tel calcul, il est commode de « régulariser » les fonctions à intégrer en remplaçant $1/k^2$ par $1/(k^2 + \eta^2)$ où η est un infiniment petit positif.

(**) L'absence de \hbar indique que ces corrections seraient identiques dans une théorie classique. Voir Landau et Lifchitz, Théorie du Champ, § 65.

(***) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », chapitre V, partie D.

(iii) La dynamique relativiste des particules de spin $\frac{1}{2}$ est décrite par l'hamiltonien de Dirac. L'hamiltonien d'interaction avec le champ transverse s'écrit alors $-cq\alpha \cdot A(\mathbf{r})$ où les trois composantes du vecteur α sont trois matrices de Dirac représentant l'opérateur vitesse (*). La même démarche que celle que nous avons exposée dans ce paragraphe conduit à l'interaction de Breit entre les particules 1 et 2 (**)

$$V_B = -\frac{q_1 q_2}{8\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{\alpha_1 \cdot \alpha_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{[\alpha_1 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)][\alpha_2 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \right\} \quad (\text{F.5})$$

De même que (F.4), il s'agit d'un hamiltonien effectif décrivant de façon approchée l'interaction réelle.

2. Interaction de Van der Waals entre deux atomes neutres

Soient deux atomes neutres A et A' situés aux points \mathbf{R} et \mathbf{R}' . Nous noterons D leur distance et \mathbf{u} le vecteur unitaire de la droite qui les joint :

$$D = |\mathbf{R} - \mathbf{R}'| \quad ; \quad \mathbf{u} = (\mathbf{R} - \mathbf{R}')/D \quad (\text{F.6})$$

Considérons l'effet de leur interaction avec le champ transverse lorsqu'il sont tous deux dans leur état fondamental $|a\rangle$ et $|a'\rangle$. Nous utiliserons l'approximation dipolaire électrique. Il est commode alors de se placer dans le point de vue exposé dans le paragraphe 5 de l'appendice, où l'hamiltonien d'interaction avec le champ transverse est :

$$H'_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) - \mathbf{d}' \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}') \quad (\text{F.7})$$

\mathbf{d} étant le moment dipolaire électrique de A , \mathbf{d}' celui de A' et \mathbf{E}_\perp l'opérateur champ donné par la formule (29) de l'appendice. Rappelons que, dans ce point de vue, il n'y a plus d'interaction de Coulomb directe entre A et A' , et que $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ représente, en dehors des systèmes de charges, le champ électrique total. La totalité de l'interaction entre les deux atomes est véhiculée par le champ transverse. Elle apparaît comme résultant d'un échange de photons virtuels. De façon à identifier la modification de l'énergie des deux atomes dans leur état fondamental, considérons l'amplitude de probabilité pour que le système global, initialement dans l'état

$$|\varphi_i\rangle = |a, a'; 0\rangle \quad (\text{F.8})$$

représentant les deux atomes en présence du vide de photons, soit resté dans cet état après un temps T .

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », complément A_V .

(**) Voir par exemple Bethe and Salpeter, Sect. 38.

L'émission d'un photon par l'un des atomes dans l'état $|a\rangle$ (resp. $|a'\rangle$) s'accompagne nécessairement d'une transition vers un état excité $|b\rangle$ (resp. $|b'\rangle$). La conservation de l'énergie nécessite alors une absorption ou une émission ultérieures pour permettre un retour de l'atome à l'état fondamental. A l'ordre 2, il ne peut donc y avoir qu'émission et absorption par le même atome (c'est le diagramme de la figure 32α), l'autre restant spectateur. Les premiers diagrammes dans lesquels les deux atomes sont impliqués et qui les ramènent tous deux à l'état fondamental dans l'état final comportent nécessairement quatre interactions. Deux exemples sont donnés sur la figure 36. L'ensemble des diagrammes d'ordre 4 s'obtient en variant l'ordre temporel des différentes interactions.

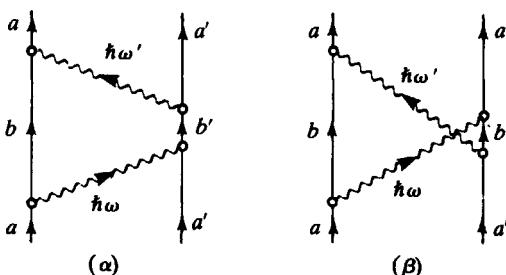


Figure 36. Exemples de diagrammes décrivant l'interaction de Van der Waals entre deux atomes neutres dans l'état fondamental par échange de photons transverses. Pour interagir avec le champ et revenir dans l'état fondamental, chaque atome doit nécessairement émettre ou absorber deux photons, de sorte que l'interaction entre les deux atomes nécessite l'échange d'au moins deux photons. Dix autres diagrammes peuvent être obtenus à partir des diagrammes 36α et 36β en changeant l'ordre temporel des quatre vertex.

Le processus élémentaire à la base de l'interaction de Van der Waals est donc, dans le point de vue adopté ici (c'est-à-dire utilisant l'hamiltonien (F.7)), l'échange de *paires* de photons entre les deux atomes. Notons que les différents états intermédiaires sont tous non résonnants avec l'état initial (qui est l'état fondamental du système global atomes + photons). Comme pour les corrections radiatives, l'amplitude de probabilité pour que le système reste dans l'état initial (qui est un état discret du système global, bien isolé de tous les autres), permet de calculer la variation ΔE de l'énergie de cet état initial $|\varphi_i\rangle$ (voir § B-1 du chapitre I). Cette variation d'énergie dépend de la distance D entre A et A' : c'est l'interaction de Van der Waals. Le

calcul général de ΔE est trop long pour être détaillé ici (*), mais nous allons identifier ci-dessous deux cas limites simples.

Remarquons tout d'abord que les différents modes du champ transverse ne contribuent pas de façon uniforme à l'interaction. Les modes de basse fréquence sont peu nombreux (densité de modes en $k^2 dk$) et l'élément de matrice de couplage est en $\sqrt{\omega}$. Par ailleurs, les contributions des modes de vecteur d'onde élevé se brouillent mutuellement par suite de la variation rapide, d'un mode à l'autre, de la différence de phase entre les facteurs $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ et $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}')$ qui apparaissent dans les éléments de matrice d'interaction relatifs à chaque photon échangé. Il en résulte que la contribution essentielle à l'interaction provient des modes dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance D entre les atomes. Deux cas doivent être distingués suivant que l'énergie $\hbar c/D$ de ces photons est grande ou petite par rapport à l'énergie d'excitation typique $|E_a - E_b|$ des atomes. Dans le premier cas, correspondant à une distance entre atomes faible devant $\lambda_{ab} = \hbar c / |E_a - E_b|$, l'énergie d'excitation des atomes est négligeable devant celle des photons dans les états intermédiaires. Dans le second, la distance D est grande devant λ_{ab} et l'énergie d'excitation des atomes est prépondérante. Dans chacun de ces cas limites, nous allons décomposer le processus global en deux processus successifs.

a) DISTANCE FAIBLE : $D \ll \lambda_{ab}$

L'énergie des photons virtuels est grande. Ils ne peuvent exister que pendant un intervalle de temps très court. Les deux « lignes de photon » de la figure 36α sont quasi horizontales, par comparaison à l'intervalle de temps qui sépare ces deux lignes et pendant lequel les deux atomes sont excités. L'échange d'un photon entre les deux atomes peut alors être considéré comme un processus quasi instantané, décrit par un hamiltonien effectif qui excite simultanément les deux atomes. Ce processus est analogue à celui étudié au paragraphe F-1 ci-dessus, et l'hamiltonien effectif qui le décrit a une structure identique à (F.3), au remplacement près de qp/m par \mathbf{d} , et de $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ par $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$. Il vient ainsi

$$\begin{aligned}\delta V &= - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_0 L^3} (\mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{d}) (\mathbf{\epsilon} \cdot \mathbf{d}') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} + \text{h.c.} \\ &= - \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{ij} d_i d'_j \delta_{ij}^\perp (\mathbf{R} - \mathbf{R}')\end{aligned}\quad (\text{F.9})$$

(*) Voir par exemple Power, chapitres VII et VIII.

où δ_{ij}^\perp est la fonction δ transverse (*) qui, loin de l'origine, vaut

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \frac{-\delta_{ij} + 3u_i u_j}{4\pi D^3} \quad (\text{F.10})$$

Cet hamiltonien effectif δV n'est rien d'autre que l'interaction dipôle-dipôle entre les deux atomes neutres. Il couple l'état $|a,a'\rangle$ aux états excités $|b,b'\rangle$. Il en résulte, au second ordre en δV , un déplacement de l'énergie de l'état $|a,a'\rangle$ donné par

$$\Delta E = \sum_{bb'} \frac{\langle a,a' | \delta V | b,b' \rangle \langle b,b' | \delta V | a,a' \rangle}{E_a + E_{a'} - E_b - E_{b'}} \quad (\text{F.11})$$

dont la dépendance vis-à-vis de D découle de celle de δV donnée par (F.9) et (F.10) :

$$\Delta E = C_6/D^6 \quad (\text{F.12})$$

Le coefficient C_6 s'exprime en fonction des éléments de matrice dipolaires des atomes A et A' et du dénominateur d'énergie apparaissant dans (F.11). ΔE représente l'interaction de Van der Waals habituelle.

Remarque

Dans le point de vue habituel (hamiltonien d'interaction en A.p), il existe une interaction de Coulomb instantanée entre les deux atomes, V_{Coul}^{AB} . L'effet de V_{Coul}^{AB} sur l'état fondamental des deux atomes est nul à l'ordre 1 et redonne l'interaction de Van der Waals (F.12) à l'ordre 2.

b) GRANDE DISTANCE $\lambda_{ab} \ll D$

L'énergie des photons échangés est faible devant l'énergie d'excitation des atomes. La durée de la transition virtuelle de chaque atome dans l'état excité est courte comparée au temps de propagation des photons. Une telle situation correspond à des processus du type de celui représenté sur la figure 37.

A la limite des très grandes distances, le processus global peut être considéré comme l'émission quasi instantanée d'une paire de photons par l'un des atomes, suivie par l'absorption de la paire par l'autre atome après un certain intervalle de temps. La comparaison avec le cas des

(*) La sommation sur les polarisations ϵ dans la première ligne de (F.9) fait en effet apparaître la fonction $\delta_{ij} - (k_i k_j / k^2)$ (voir la formule (54) du complément A_I). L'intégration sur \mathbf{k} du produit de cette fonction par $\exp i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ donne ensuite une transformée de Fourier qui n'est autre que la fonction δ transverse apparaissant dans la deuxième ligne de (F.9). Pour une étude des propriétés de δ_{ij}^\perp , voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », complément A_I .

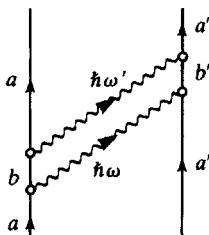


Figure 37. Exemple de processus d'échange de deux photons qui devient prépondérant à grande distance. L'énergie des photons virtuels échangés est très faible devant l'énergie d'excitation des atomes et la durée d'excitation virtuelle de chaque atome est très courte devant le temps de propagation des photons d'un atome à l'autre.

courtes distances permet de prévoir sans calcul supplémentaire la dépendance de ΔE vis à vis de D . Considérons en effet les défauts d'énergie des divers états intermédiaires, qui figurent au dénominateur de l'expression de ΔE . Pendant les processus d'excitation virtuelle de chaque atome, au cours desquels la paire de photons est émise ou absorbée, le défaut d'énergie est de l'ordre de $E_b - E_a$ ou $E_{b'} - E_{a'}$ puisque $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$ sont négligeables devant ces énergies d'excitation atomiques. Pendant la propagation des photons, il est égal à $\hbar\omega + \hbar\omega'$. Dans les processus considérés au paragraphe a), les défauts d'énergie étaient successivement $\hbar\omega$, $E_b + E_{b'} - E_a - E_{a'}$, $\hbar\omega'$ puisque, dans les premiers et troisièmes états intermédiaires, on pouvait alors négliger les énergies d'excitation atomiques devant $\hbar\omega$ et $\hbar\omega'$. L'énergie des photons figurait donc deux fois au dénominateur au lieu d'une seule dans le cas décrit par la figure 37. Dans le calcul des intégrales de Fourier sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' , la multiplication par k ou k' de la fonction à intégrer se traduit dans le résultat par un facteur $1/D$ supplémentaire, pour une simple raison d'homogénéité. On en déduit qu'à grande distance

$$\Delta E \propto \frac{1}{D^7} \quad (\text{F.13})$$

L'interaction de Van der Waals décroît donc plus rapidement qu'à courte distance (*). Rappelons que le passage d'un régime à l'autre se fait pour D de l'ordre de λ_{ab} , longueur d'onde des rayonnements propres des atomes.

(*) Il s'agit de l'effet Casimir et Polder, Phys. Rev. 73, 360 (1948).

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

Une présentation générale de divers processus à l'ordre le plus bas où ils apparaissent peut être trouvée dans Heitler, chapitre V et dans Power, chapitre VII. Voir aussi les ouvrages cités en référence au cours du chapitre. Ils contiennent en général des revues sur les phénomènes étudiés.

COMPLÉMENT A_{II}SIGNAUX DE PHOTODÉTECTION
ET FONCTIONS DE CORRÉLATION

A la fin de la partie B, nous avons vu que la dynamique du processus d'absorption d'un photon entre deux états atomiques discrets dépendait de l'état du champ incident. Cette dynamique dépend aussi de la nature de la transition atomique envisagée puisque, partant d'un état atomique inférieur discret, l'évolution ultérieure de l'atome n'est pas la même suivant que le niveau supérieur atteint après absorption du photon incident est discret ou appartient à un continuum.

Dans ce complément, nous présentons un traitement synthétique de ces problèmes en termes de *fonctions de corrélation* des deux systèmes en interaction, l'atome et le champ. Bien que limité à l'ordre le plus bas de la théorie des perturbations, un tel traitement permet de classer les diverses situations qui peuvent apparaître en comparant les divers temps caractéristiques du problème : la durée de l'interaction, les temps de corrélation caractérisant la dynamique des fluctuations du dipole atomique et du champ électrique incident, le temps de relaxation atomique... Il est clair également que l'analyse quantitative des processus d'excitation d'un atome placé dans un champ incident est essentielle si l'on veut extraire des probabilités d'excitation mesurées sur l'atome, c'est-à-dire des *signaux de photodétection*, des informations sur l'état du champ incident. Nous montrons ainsi dans ce complément comment il est possible de relier les signaux de photodétection aux fonctions de corrélation du champ de rayonnement incident. Les expressions ainsi obtenues sont à la base de l'interprétation des diverses expériences d'optique quantique moderne.

Nous commençons (§ 1) par présenter quelques modèles simples de photodétecteurs atomiques et par préciser le type de mesures qui peuvent être effectuées sur eux. Nous établissons ensuite (§ 2), à partir d'un calcul perturbatif des amplitudes d'excitation, une expression générale reliant la probabilité d'excitation de l'atome à des fonctions de corrélation du dipole atomique et du champ incident. Les résultats obtenus sont alors appliqués successivement au cas d'un photodétecteur à bande large (§ 3) puis étroite (§ 4). Ils permettent de montrer qu'il est possible de mesurer ainsi, soit l'intensité instantanée du champ incident, soit sa densité spectrale. Nous analysons enfin (§ 5) les corrélations entre les signaux de deux photodétecteurs à bande large et montrons qu'ils permettent d'accéder à des fonctions de corrélation d'ordre supérieur du champ.

1. Modèles simples de photodétecteurs atomiques

a) PHOTODÉTECTEUR À BANDE LARGE

La plupart des photodétecteurs à bande large utilisent l'effet photoélectrique. Considérons par exemple un atome A , d'état fondamental $|a\rangle$ et dont le continuum d'ionisation commence à une distance E_I (E_I est l'énergie d'ionisation) au-dessus de l'énergie de $|a\rangle$ (Figure 1).

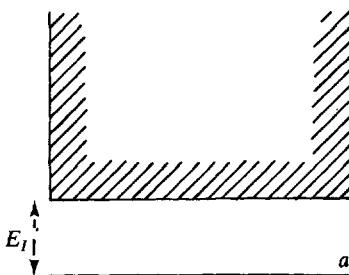


Figure 1. Niveau fondamental et continuum d'ionisation d'un atome utilisé comme photodétecteur à bande large.

Supposons que cet atome, dans l'état $|a\rangle$, interagisse pendant un temps Δt avec un champ de rayonnement évoluant à des fréquences toutes supérieures à E_I/\hbar . On mesure la probabilité pour que l'atome ait été photoionisé au bout du temps Δt en détectant par exemple le photoélectron produit par l'ionisation (avec une efficacité qui, pour simplifier, sera supposée être égale à 100 %). L'étendue de la réponse spectrale d'un tel détecteur est mesurée par la largeur de la distribution des niveaux du continuum auxquels l'état fondamental est couplé efficacement par l'hamiltonien d'interaction. Le détecteur est dit à bande large si cette étendue est grande devant la largeur spectrale du rayonnement incident.

b) PHOTODÉTECTEUR À BANDE ÉTROITE

Supposons maintenant que l'atome A ait un niveau excité discret $|b\rangle$ situé à une distance $\hbar\omega_0$ au dessus du niveau fondamental $|a\rangle$ (Figure 2). Partant de l'état $|a\rangle$, cet atome est irradié pendant un temps Δt par un rayonnement incident dont le spectre de fréquences est suffisamment centré autour de ω_0 pour qu'aucune transition atomique autre que $a \rightarrow b$ ne puisse être excitée de manière appréciable. On mesure au bout du temps Δt la probabilité pour que l'atome ait été porté dans l'état excité b , par exemple en l'éclairant à cet instant avec

un rayonnement intense capable de l'ioniser à coup sûr à partir de $|b\rangle$, mais certainement pas à partir de $|a\rangle$, et en détectant le photoélectron produit par l'ionisation.

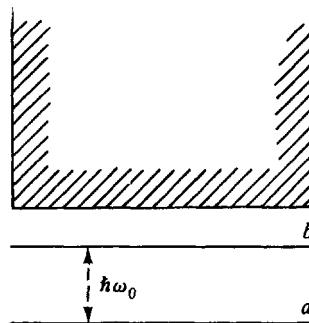


Figure 2. Niveau fondamental, niveau excité discret et continuum d'ionisation d'un atome utilisé comme photodétecteur à bande étroite.

Nous verrons plus loin que la probabilité d'excitation de l'atome en $|b\rangle$ est reliée à la densité spectrale du rayonnement incident à la fréquence ω_0 . Un tel photodétecteur est donc à bande étroite. Nous préciserons également l'influence de la largeur naturelle Γ du niveau excité $|b\rangle$ (due au processus d'émission spontanée) et les divers régimes qui peuvent apparaître suivant les valeurs relatives de Γ , $\Delta\omega_R$ (largeur spectrale du rayonnement incident), Δt^{-1} , Ω_1 (fréquence de Rabi caractérisant l'interaction entre l'atome et le champ incident).

Remarque

Le photodétecteur de la figure 1 peut également être utilisé comme un photodétecteur à bande étroite si un dispositif de filtrage en énergie du photoélectron est incorporé au dispositif de mesure. Par suite de la conservation de l'énergie, un photoélectron, d'énergie cinétique E_c , ne peut en effet être produit que par les composantes du champ incident de fréquence ω telle que $\hbar\omega = E_I + E_c$.

2. Probabilité d'excitation et fonctions de corrélation

a) HAMILTONIEN - OPÉRATEUR D'ÉVOLUTION

L'hamiltonien H du système global atome photodétecteur + rayonnement s'écrit :

$$H = H_A + H_R + V \quad (1)$$

H_A est l'hamiltonien de l'atome (dont le centre de masse est supposé fixe en $\mathbf{0}$), H_R celui du rayonnement

$$H_R = \sum_i \hbar \omega_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}) \quad (2)$$

et V l'hamiltonien d'interaction qui, dans le point de vue dipolaire électrique (voir appendice, § 5), est égal à

$$V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \quad (3)$$

où \mathbf{d} est le moment dipolaire électrique de l'atome et $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})$ l'opérateur champ (*), donné par le développement (89) de l'appendice et évalué au centre de masse de l'atome. Pour simplifier les calculs, nous ignorerons le caractère vectoriel de \mathbf{d} et \mathbf{E} (on peut supposer par exemple que \mathbf{d} et \mathbf{E} sont tous deux parallèles à $0z$), ce qui permet de remplacer (3) par :

$$V = -d E(\mathbf{0}) \quad (4)$$

En représentation d'interaction par rapport à $H_A + H_R$, l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(\Delta t, 0)$ entre les instants 0 et Δt s'écrit, à l'ordre 1 en V (voir l'expression (14) du complément A₁)

$$\tilde{U}(\Delta t, 0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt \tilde{V}(t) \quad (5)$$

où

$$\tilde{V}(t) = e^{i(H_A + H_R)t/\hbar} V e^{-i(H_A + H_R)t/\hbar} = -\tilde{d}(t) \tilde{E}(\mathbf{0}, t) \quad (6)$$

avec

$$\tilde{d}(t) = e^{iH_A t/\hbar} d e^{-iH_A t/\hbar} \quad (7.a)$$

$$\tilde{E}(\mathbf{0}, t) = e^{iH_R t/\hbar} E(\mathbf{0}) e^{-iH_R t/\hbar} \quad (7.b)$$

b) CALCUL DE LA PROBABILITÉ POUR QUE L'ATOME AIT QUITTÉ L'ÉTAT FONDAMENTAL AU BOUT D'UN TEMPS Δt

À l'instant initial $t = 0$, l'atome est dans l'état fondamental $|a\rangle$ de H_A , et le champ de rayonnement incident dans l'état $|\varphi_R\rangle$, de sorte que l'état initial du système global est, en représentation d'interaction

$$|\tilde{\psi}(0)\rangle = |a\rangle \otimes |\varphi_R\rangle = |a, \varphi_R\rangle \quad (8)$$

(*) Pour simplifier les notations, nous omettons désormais l'indice \perp dans $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})$.

On laisse l'atome interagir avec le rayonnement pendant un temps Δt . Nous nous proposons, dans ce paragraphe, de calculer la probabilité $P_{exc}(\Delta t)$ pour que, à l'issue de cet intervalle de temps, l'atome ait été porté dans n'importe quel état excité $|c\rangle$ (du spectre discret ou continu de H_A).

Soit $\{|\mu\rangle\}$ une base orthonormée d'états du rayonnement (par exemple les états propres de H_R). La probabilité pour que le système global soit passé de l'état initial (8) à l'état $|c,\mu\rangle$ au bout d'un temps Δt est égale, d'après (5), (6) et (7), à

$$\begin{aligned} & |\langle c,\mu | \tilde{U}(\Delta t,0) | a, \varphi_R \rangle|^2 = \\ & = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' \langle \varphi_R | \tilde{E}(0,t') | \mu \rangle \langle \mu | \tilde{E}(0,t'') | \varphi_R \rangle \times \\ & \times \langle a | \tilde{d}(t') | c \rangle \langle c | \tilde{d}(t'') | a \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

Nous avons utilisé l'hermiticité de d et $E(0)$ et le fait que $c \neq a$ (de sorte que le premier terme de (5) ne contribue pas). Comme on n'observe pas l'état final du rayonnement, la probabilité d'excitation $P_{exc}(\Delta t)$ définie plus haut s'obtient en sommant (9) sur μ et sur $c \neq a$

$$P_{exc}(\Delta t) = \sum_{\mu} \sum_{c \neq a} |\langle c,\mu | \tilde{U}(\Delta t,0) | a, \varphi_R \rangle|^2 \quad (10)$$

Par ailleurs, comme l'opérateur d est impair, on a

$$\langle a | d | a \rangle = 0 \quad (11)$$

La probabilité de transition (9) est donc nulle pour $c = a$ et la restriction $c \neq a$ n'est plus nécessaire dans (10). La sommation sur μ et c de l'expression (9) fait alors apparaître deux relations de fermeture et conduit à

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_A^*(t',t'') G_R(t',t'') \quad (12)$$

où

$$G_A^*(t',t'') = \langle a | \tilde{d}(t') \tilde{d}(t'') | a \rangle \quad (13.a)$$

$$G_R(t',t'') = \langle \varphi_R | \tilde{E}(0,t') \tilde{E}(0,t'') | \varphi_R \rangle \quad (13.b)$$

Les fonctions G_A ou G_R sont les valeurs moyennes dans l'état initial de l'atome ou du rayonnement d'un produit de deux opérateurs atomiques ou de rayonnement pris, en représentation d'interaction, à des instants différents t' et t'' . Ces « moyennes à 2 temps » sont appelées également des *fonctions de corrélation*. La probabilité d'excitation $P_{exc}(\Delta t)$ de l'atome peut donc être exprimée, à l'ordre le plus bas en

V , comme une double intégrale d'un produit de deux fonctions de corrélation relatives aux deux systèmes en interaction, la fonction de corrélation du dipôle d et la fonction de corrélation du champ $E(0)$. Notons que ces fonctions de corrélation correspondent à une évolution libre, puisque les évolutions de \tilde{d} et $\tilde{E}(0)$ sont, d'après (7), régies respectivement par H_A et H_R .

Remarques

- (i) Les moyennes à 2 temps (13) ne sont pas nécessairement réelles. Leurs parties réelle et imaginaire sont reliées à des quantités ayant un sens physique précis : la fonction de corrélation symétrique décrivant la dynamique des fluctuations, la susceptibilité linéaire décrivant la réponse linéaire du système à une perturbation (voir également complément A_{IV}).
- (ii) Dans le point de vue dipolaire électrique que nous adoptons ici, l'opérateur champ $E(0)$, qui apparaît dans l'hamiltonien d'interaction (4), représente physiquement, non pas le champ électrique transverse en 0 , mais *l'induction* électrique, divisée par ϵ_0 (voir par exemple le paragraphe 5-c de l'appendice, ou « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », complément A_{IV}). La probabilité d'excitation (12) est donc reliée en fait à la fonction de corrélation de l'induction électrique en 0 . Mais cette induction évolue librement (l'évolution de \tilde{E} dans (13.b) n'est due qu'à l'hamiltonien H_R) et la valeur moyenne du produit des deux \tilde{E} est prise dans l'état $|\varphi_R\rangle$ qui décrit le champ libre incident en l'absence de photodétecteur. La fonction de corrélation libre de l'induction électrique en 0 dans l'état $|\varphi_R\rangle$ est donc la même que celle du champ électrique libre incident en 0 en l'absence de photodétecteur. C'est la raison pour laquelle nous pouvons considérer également la fonction de corrélation $G_R(t',t'')$ écrite en (13.b) comme une fonction de corrélation du champ électrique incident.
- (iii) Au cours de la transition $|a, \varphi_R\rangle \rightarrow |c, \mu\rangle$, l'énergie de l'atome varie de $E_c - E_a$. La variation moyenne $\langle \Delta H_A \rangle$ de l'énergie atomique au cours du temps Δt est donc égale à

$$\langle \Delta H_A \rangle = \sum_{\mu} \sum_{c \neq a} (E_c - E_a) |\langle c, \mu | \tilde{U}(\Delta t, 0) | a, \varphi_R \rangle|^2 \quad (14)$$

Par ailleurs, le report de (9) dans (14) fait apparaître la quantité $(E_c - E_a) \langle c | \tilde{d}(t'') | a \rangle$ qui peut s'écrire

$$\begin{aligned} (E_c - E_a) \langle c | \tilde{d}(t'') | a \rangle &= (E_c - E_a) e^{i(E_c - E_a)t''/\hbar} \langle c | d | a \rangle \\ &= -i \hbar \frac{d}{dt''} \langle c | \tilde{d}(t'') | a \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

Finalement, en utilisant (15), on peut, en suivant une démarche analogue à celle conduisant de (10) à (12), transformer (14) en

$$\langle \Delta H_A \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_R(t', t'') \frac{d}{dt''} G_A^*(t', t'') \quad (16)$$

D'autres grandeurs physiques que la probabilité d'excitation, comme la variation moyenne d'énergie atomique, peuvent donc être reliées également à des fonctions de corrélation des deux systèmes en interaction (voir complément A_{IV}).

c) FONCTION DE CORRÉLATION DU DIPÔLE ATOMIQUE

Revenons à l'expression (13.a) de G_A^* . En utilisant (7.a) et en insérant la relation de fermeture sur les états propres $|c\rangle$ de H_A entre $\tilde{d}(t')$ et $\tilde{d}(t'')$, nous obtenons

$$\begin{aligned} G_A^*(t', t'') &= \sum_c \langle a | e^{iH_A t'/\hbar} d e^{-iH_A t''/\hbar} | c \rangle \langle c | e^{iH_A t''/\hbar} d e^{-iH_A t'/\hbar} | a \rangle \\ &= \sum_c |\langle a | d | c \rangle|^2 e^{-i\omega_{ca}(t' - t'')} \end{aligned} \quad (17)$$

$G_A^*(t', t'')$ apparaît ainsi comme une somme d'exponentielles évoluant aux diverses fréquences de Bohr $\omega_{ca} = (E_c - E_a)/\hbar$ des transitions $c \leftrightarrow a$ partant de a , pondérées par les carrés des modules des éléments de matrice de d entre les deux niveaux de ces transitions.

Il est possible de réécrire (17) sous la forme

$$G_A^*(t', t'') = G_A^*(t' - t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega(t' - t'')} \mathcal{G}_A(\omega) d\omega \quad (18)$$

où

$$\mathcal{G}_A(\omega) = \sum_c |\langle a | d | c \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{ca}) \quad (19)$$

La transformée de Fourier $\mathcal{G}_A(\omega)$ de $G_A^*(t' - t'')$ est donc une superposition de fonctions delta centrées aux diverses fréquences de Bohr des transitions partant de a , pondérées par les poids $|\langle a | d | c \rangle|^2$.

Il est clair sur (17) que $G_A^*(t', t'')$ ne dépend que de $t' - t''$. Ceci est dû au fait que l'état $|a\rangle$, dans lequel est calculée la fonction de corrélation, est un état propre de H_A , donc un état stationnaire (de l'atome libre), dont les propriétés sont invariantes par translation dans le temps.

d) FONCTION DE CORRÉLATION DU CHAMP

L'opérateur $E(\mathbf{0})$ est, d'après la formule (89) de l'appendice, une superposition linéaire des opérateurs d'annihilation et de création a_j et a_j^\dagger des divers modes j du champ. Comme, d'après (7.b), l'évolution de $\tilde{E}(\mathbf{0}, t)$ est due uniquement à H_R , chaque a_j se retrouve

multiplié par $e^{-i\omega_j t}$ dans $\tilde{E}(\mathbf{0},t)$, chaque a_j^+ par $e^{i\omega_j t}$, où ω_j est la fréquence du mode j . Introduisons alors l'opérateur $\tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t)$ qui est la partie de $\tilde{E}(\mathbf{0},t)$ ne contenant que des exponentielles en $\exp(-i\omega_j t)$, et l'opérateur adjoint $\tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t)$ qui ne contient que des exponentielles en $\exp(i\omega_j t)$.

$$\tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t) = i \sum_j \sqrt{\frac{\hbar\omega_j}{2\varepsilon_0 L^3}} a_j e^{-i\omega_j t} \quad (20.a)$$

$$\tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t) = -i \sum_j \sqrt{\frac{\hbar\omega_j}{2\varepsilon_0 L^3}} a_j^+ e^{i\omega_j t} \quad (20.b)$$

$\tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t)$ est appelée « composante de fréquence positive ». En remplaçant \tilde{E} par $\tilde{E}^{(+)} + \tilde{E}^{(-)}$ dans (13.b), on obtient alors

$$\begin{aligned} G_R(t',t'') = & \langle \varphi_R | \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t'') | \varphi_R \rangle + \\ & + \langle \varphi_R | \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t') \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t'') | \varphi_R \rangle + \\ & + \langle \varphi_R | \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t'') | \varphi_R \rangle + \\ & + \langle \varphi_R | \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t') \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t'') | \varphi_R \rangle \end{aligned} \quad (21)$$

Supposons que le champ soit dans un état stationnaire, c'est-à-dire dans un mélange statistique d'états propres $|n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle$ de H_R (n_j étant le nombre de photons dans le mode j), de poids $p(n_1, n_2, \dots, n_j, \dots)$. Il est facile alors de voir que les deux derniers termes de (21) sont nuls, car ils font intervenir des moyennes du type $\langle a_j a_l \rangle$ ou $\langle a_j^+ a_l^+ \rangle$ qui sont nulles dans chaque état $|n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle$ du mélange. Par contre, les deux premiers termes de (21) sont non nuls et ne dépendent que de $t' - t''$. Par exemple, le premier terme de (21) vaut, compte tenu de (20)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0},t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0},t'') \rangle &= G_R^N(t' - t'') = \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_j \hbar\omega_j \langle n_j \rangle e^{i\omega_j(t' - t'')} \end{aligned} \quad (22)$$

où

$$\langle n_j \rangle = \langle a_j^+ a_j \rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_j, \dots} n_j p(n_1, n_2, \dots, n_j, \dots) \quad (23)$$

est le nombre moyen de photons dans le mode j . L'indice N dans G_R^N rappelle que les opérateurs sont rangés dans l'ordre normal dans la fonction de corrélation (22) (opérateurs d'annihilation à droite des

opérateurs de création). On peut également écrire (22) sous la forme

$$G_R^N(t' - t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{G}_R^N(\omega) e^{i\omega(t' - t'')} d\omega \quad (24.a)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_R^N(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_R^N(t' - t'') e^{-i\omega(t' - t'')} d(t' - t'') \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \tilde{E}^{(-)}(0, t') \tilde{E}^{(+)}(0, t'') \rangle e^{-i\omega(t' - t'')} d(t' - t'') \end{aligned} \quad (24.b)$$

qui est la transformée de Fourier de $G_R^N(t' - t'')$, peut encore s'écrire d'après (22) sous la forme

$$\mathcal{G}_R^N(\omega) = \frac{1}{2\epsilon_0 L^3} \sum_j \hbar \omega_j \langle n_j \rangle \delta(\omega - \omega_j) \quad (24.c)$$

Il est clair sur (24.c) que $\mathcal{G}_R^N(\omega)$ caractérise la répartition en fréquence de l'énergie moyenne du champ, c'est-à-dire encore, sa densité spectrale. Un calcul analogue donne pour le second terme de (21), que nous noterons $G_R^A(t' - t'')$ car les opérateurs y sont rangés dans l'ordre antinormal

$$G_R^A(t' - t'') = \int \mathcal{G}_R^A(\omega) e^{i\omega(t' - t'')} d\omega \quad (25.a)$$

où

$$\mathcal{G}_R^A(\omega) = \frac{1}{2\epsilon_0 L^3} \sum_j \hbar \omega_j (\langle n_j \rangle + 1) \delta(\omega_j + \omega) \quad (25.b)$$

Supposons enfin que le rayonnement incident ait une densité spectrale $\mathcal{G}_R^N(\omega)$, centrée autour d'une fréquence centrale $\bar{\omega}$, et s'étendant sur un intervalle de largeur $\Delta\omega_R$. A partir de l'équation (24.a) il est possible de montrer que

$$G_R^N(t' - t'') = e^{i\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(t' - t'') \quad (26.a)$$

où $C_R^N(t' - t'')$ est une fonction enveloppe donnée par

$$C_R^N(t' - t'') = \int \mathcal{G}_R^N(\omega + \bar{\omega}) e^{i\omega(t' - t'')} d\omega \quad (26.b)$$

$C_R^N(t' - t'')$ est la transformée de Fourier d'une fonction de largeur $\Delta\omega_R$, centrée en $\omega = 0$, et tend donc vers zéro quand $|t' - t''|$ devient

grand devant le temps $1/\Delta\omega_R$ qui peut être considéré comme le temps de corrélation du champ incident.

Pour conclure ce paragraphe, montrons que, seule, la fonction $G_R^N(t' - t'')$ contribue de manière significative à la probabilité d'excitation (12). Considérons pour cela l'autre fonction de corrélation du champ $G_R^A(t' - t'')$, donnée en (25), et comparons la à la fonction de corrélation atomique $G_A^*(t' - t'')$ donnée en (17). Ces deux fonctions de corrélation apparaissent toutes deux comme une somme d'exponentielles de fréquences positives, variant respectivement comme $\exp[-i\omega_j(t' - t'')]$ et $\exp[-i\omega_{ca}(t' - t'')]$ (ω_{ca} est toujours positif puisque a est l'état fondamental). Le produit de $G_A^*(t' - t'')$ par $G_R^A(t' - t'')$ est donc une fonction de $t' - t''$ évoluant très vite, à des fréquences optiques, et dont l'intégrale sur t' et t'' dans (12) donnera un résultat négligeable si Δt est grand devant une période optique. Par contre, $G_R^N(t' - t'')$ est, d'après (24.a) et (24.c), une somme d'exponentielles de fréquences négatives, en $\exp[i\omega_j(t' - t'')]$. Le produit de $G_R^N(t' - t'')$ par $G_A^*(t' - t'')$ pourra donc contenir des composantes variant très peu avec $t' - t''$ (si les deux densités spectrales (19) et (24.c) se recouvrent) qui contribueront de manière importante à l'intégrale (12). Nous pouvons donc, dans (12), négliger la contribution de $G_R^A(t' - t'')$ devant celle de $G_R^N(t' - t'')$ et écrire

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_A^*(t' - t'') G_R^N(t' - t'') \quad (27)$$

Un tel résultat exprime que, pour un atome partant de l'état fondamental, les seuls processus susceptibles d'être résonnantes sont les processus d'absorption d'un photon, au cours desquels l'énergie gagnée par l'atome est perdue par le champ. La fonction de corrélation G_R^N , définie en (22), où les opérateurs champs sont rangés dans l'ordre normal, caractérise l'aptitude du champ à induire des processus d'absorption, alors que l'autre fonction de corrélation (antinormale) G_R^A intervient pour les processus d'émissions induite et spontanée (associés respectivement aux termes $\langle n_i \rangle$ et 1 de la parenthèse de (25.b)).

3. Photodétection à bande large

a) CONDITION SUR LES FONCTIONS DE CORRÉLATION

Supposons que toutes les fréquences du rayonnement incident soient supérieures à la fréquence d'ionisation E_I/\hbar de l'atome utilisé comme photodétecteur. L'excitation des niveaux discrets situés en dessous du seuil d'ionisation peut alors être négligée, car elle ne sera jamais résonnante, et on pourra ne conserver dans l'expression (19) de

$\mathcal{G}_A(\omega)$ que la contribution des états du continuum d'ionisation. La fonction $\mathcal{G}_A(\omega)$ caractérise la sensibilité spectrale du photodétecteur, c'est-à-dire la manière dont il réagit aux diverses fréquences incidentes. Pour que le photodétecteur puisse être considéré comme étant à bande large, il faut que la largeur $\Delta\omega_A$ de $\mathcal{G}_A(\omega)$ soit très grande devant la largeur $\Delta\omega_R$ de $\mathcal{G}_R^N(\omega)$

$$\Delta\omega_A \gg \Delta\omega_R \quad (28)$$

La réponse du photodétecteur varie alors très peu sur l'étendue du spectre du rayonnement incident.

La condition (28) entraîne que la largeur temporelle de $G_A^*(t' - t'')$, de l'ordre de $1/\Delta\omega_A$ autour de $t' - t'' = 0$, est beaucoup plus petite que celle de la fonction $C_R^N(t' - t'')$ définie en (26) et qui est de l'ordre de $1/\Delta\omega_R$.

b) PROBABILITÉ DE PHOTOIONISATION PAR UNITÉ DE TEMPS

Reportons (26.a) dans (27). Comme $C_R^N(t' - t'')$ varie beaucoup plus lentement que $G_A^*(t' - t'')$ autour de $t' - t'' = 0$, on peut remplacer $t' - t''$ par 0 dans $C_R^N(t' - t'')$, ce qui donne

$$C_R^N(0) = G_R^N(0) = \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t') \rangle = \langle E^{(-)}(\mathbf{0}) E^{(+)}(\mathbf{0}) \rangle \quad (29)$$

Comme le champ est dans un état stationnaire, la valeur moyenne à un temps $\langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t') \rangle$ ne dépend pas en effet du temps. Il vient alors

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \langle E^{(-)}(\mathbf{0}) E^{(+)}(\mathbf{0}) \rangle \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_A^*(t' - t'') e^{i\tilde{\omega}(t' - t'')} \quad (30)$$

Le domaine d'intégration de l'intégrale sur t' et t'' de (30) est représenté sur la figure 3. Par suite de la décroissance de $G_A^*(t' - t'')$ avec $t' - t''$, l'intégrand de (30) n'est différent de zéro que dans un ruban de largeur $1/\Delta\omega_A$ autour de la diagonale principale (partie hachurée de la figure).

Supposons que

$$\Delta t \gg \Delta\omega_A^{-1} \quad (31)$$

Le ruban hachuré de la figure 3 est alors très étroit. Prenons pour nouvelles variables t' et $\tau = t' - t''$. La condition (31) permet de prendre, pour limites d'intégration sur τ , $-\infty$ et $+\infty$ et il vient

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{\Delta t}{\hbar^2} \langle E^{(-)}(\mathbf{0}) E^{(+)}(\mathbf{0}) \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} G_A^*(\tau) e^{i\tilde{\omega}\tau} d\tau \quad (32)$$

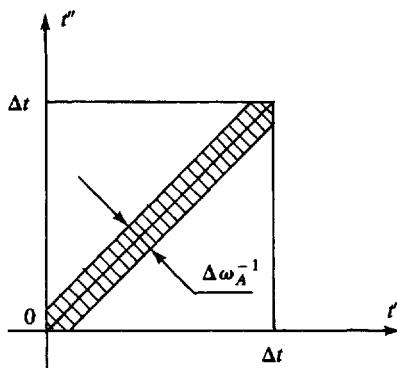


Figure 3. Domaine d'intégration intervenant dans le calcul de la probabilité d'excitation. La fonction à intégrer n'est importante que dans la zone hachurée.

Comme $P_{exc}(\Delta t)$ est proportionnel à Δt , il est possible de définir une probabilité d'excitation par unité de temps

$$w_{exc} = \frac{P_{exc}(\Delta t)}{\Delta t} = s \langle E^{(-)}(0)E^{(+)}(0) \rangle \quad (33)$$

où le facteur s est, d'après (32) et (18), égal à

$$s = \frac{2\pi}{\hbar^2} \mathcal{G}_A(\bar{\omega}) \quad (34)$$

Nous avons ainsi démontré que la probabilité d'ionisation par unité de temps était proportionnelle à la quantité $\langle E^{(-)}(0)E^{(+)}(0) \rangle$. Cette quantité peut être considérée comme caractérisant l'*intensité* totale du champ en 0 , puisque d'après (24.a),

$$\langle E^{(-)}(0)E^{(+)}(0) \rangle = G_R^N(0) = \int \mathcal{G}_R^N(\omega) d\omega, \quad (35)$$

ce qui montre que $\langle E^{(-)}(0)E^{(+)}(0) \rangle$ est l'intégrale sur toutes les fréquences de la densité spectrale du champ. La probabilité d'excitation par unité de temps w_{exc} est également proportionnelle à un facteur s qui, d'après (34), est relié à la sensibilité du photodétecteur à la fréquence moyenne $\bar{\omega}$ du rayonnement incident.

Remarques

- (i) Les conditions de validité du résultat (33) sont données en (28), (31), conditions auxquelles il faut ajouter

$$w_{exc}\Delta t \ll 1 \quad (36)$$

qui exprime que le traitement perturbatif de V est valable.

(ii) Il est possible de généraliser le calcul de ce paragraphe au cas où le rayonnement n'est pas dans un état stationnaire. Le même raisonnement que celui fait à la fin du paragraphe 2-d permet de montrer que les deux derniers termes de (21), qui sont maintenant non nuls, ne contribuent pas de manière significative à l'intégrale de (12), car ils varient trop rapidement (en $\exp[\pm i \bar{\omega}(t' + t'')]$). L'expression (27) demeure donc valable. Par contre, la valeur moyenne (29) dépend maintenant de t' , et l'on obtient alors pour $P_{exc}(\Delta t)$ le résultat

$$P_{exc}(\Delta t) = s \int_0^{\Delta t} dt' \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t') \rangle \quad (37)$$

où s est toujours donné par (34). Nous trouvons ainsi que la probabilité de photoioniser l'atome entre t' et $t' + dt'$ est égale à $w_I(\mathbf{0}, t')dt'$, où le « taux de comptage simple »

$$w_I(\mathbf{0}, t') = s \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t') \rangle \quad (38)$$

est proportionnel à l'intensité instantanée $\langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t') \rangle$.

4. Photodétection à bande étroite

a) CONDITIONS SUR LE RAYONNEMENT INCIDENT ET LE DÉTECTEUR

Supposons maintenant que le rayonnement incident ait un spectre de fréquences tel qu'il ne peut exciter de manière résonnante qu'un seul état excité discret $|b\rangle$ situé à une distance $\hbar\omega_0$ au-dessus de a , avec $E_b - E_a = \hbar\omega_0$. Il est possible alors de ne conserver dans l'expression (19) de $\mathcal{G}_A(\omega)$ que la contribution de cet état et d'obtenir ainsi

$$\mathcal{G}_A(\omega) = |d_{ab}|^2 \delta(\omega - \omega_0) \quad (39.a)$$

ce qui donne pour $G_A^*(t' - t'')$

$$G_A^*(t' - t'') = |d_{ab}|^2 e^{-i\omega_0(t' - t'')} \quad (39.b)$$

Un tel détecteur, qui correspond au schéma de niveaux de la figure 2 et qui ne répond, d'après (39.a), qu'à une seule fréquence, est dit à bande étroite. Nous verrons plus loin (§ c) comment il est possible d'affiner le modèle, en incluant dans (39.b) l'effet de la largeur naturelle du niveau excité b .

b) EXCITATION PAR UN SPECTRE DE FRÉQUENCES LARGE

Supposons que la densité spectrale \mathcal{G}_R^N du rayonnement incident ait une largeur $\Delta\omega_R$ non nulle. Dans le domaine d'intégration sur t' et t'' (voir figure 3), le produit des deux fonctions $G_A^*(t' - t'')$ et

$G_R^N(t' - t'')$ n'est non nul que dans un ruban de largeur $\Delta\omega_R^{-1}$ (qui est déterminé maintenant par G_R^N , et non plus par G_R^* comme c'était le cas dans le paragraphe 3). Si $\Delta t \gg \Delta\omega_R^{-1}$, ce ruban est très étroit, et un calcul analogue à celui du paragraphe 3-b permet, compte tenu de (39.b), de transformer (27) en

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{\Delta t}{\hbar^2} |d_{ab}|^2 \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{0}, t') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{0}, t'') \rangle e^{-i\omega_0(t' - t'')} d(t' - t'') \quad (40)$$

Il est donc possible de définir une probabilité d'excitation par unité de temps égale d'après (24.b) à

$$w_{exc} = \frac{P_{exc}(\Delta t)}{\Delta t} = 2\pi \frac{|d_{ab}|^2}{\hbar^2} \mathcal{G}_R^N(\omega_0) \quad (41)$$

Un photodétecteur à bande étroite, irradié par un rayonnement à bande large, mesure donc la densité spectrale du rayonnement incident (ou encore la transformée de Fourier de la fonction de corrélation, rangée dans l'ordre normal, du champ) à la fréquence propre ω_0 du détecteur.

Notons enfin que le traitement perturbatif précédent n'est valable que si $w_{exc} \Delta t \ll 1$. Comme par ailleurs Δt doit être très grand devant $\Delta\omega_R^{-1}$, ces deux conditions sur Δt ne sont compatibles que si $\Delta\omega_R \gg w_{exc}$, c'est-à-dire si le rayonnement incident n'est pas trop intense.

Remarque

Lorsque le rayonnement incident tombant sur le détecteur est lui aussi monochromatique, l'expression (40) n'est plus valable. Supposons par exemple que dans l'expression (24.c) de $\mathcal{G}_R^N(\omega)$, $\langle n_j \rangle$ ne soit différent de zéro que pour un seul mode j . Supposons de plus que la fréquence ω_j de ce mode coïncide avec la fréquence ω_0 du détecteur. Il vient alors

$$\mathcal{G}_R^N(\omega) = \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle \delta(\omega - \omega_0) \quad (42)$$

Le coefficient de proportionnalité de la fonction delta n'est autre que l'intensité $\langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle$. Pour le voir, il suffit d'intégrer (42) sur ω et d'utiliser (35). De (42), on déduit, compte tenu de (24.a)

$$G_R^N(t' - t'') = \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle e^{i\omega_0(t' - t'')} \quad (43)$$

Portons alors (39.b) et (43) dans l'expression (27) de $P_{exc}(\Delta t)$. Comme les deux exponentielles de (39) et (43) se compensent, l'intégrale sur t' et t'' est immédiate et donne

$$P_{exc}(\Delta t) = \frac{(\Delta t)^2}{\hbar^2} |d_{ab}|^2 \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle = \left(\frac{\Omega_1 \Delta t}{2} \right)^2 \quad (44)$$

où nous avons posé

$$\left(\frac{\Omega_1}{2}\right)^2 = \frac{|d_{ab}|^2 \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle}{\hbar^2} = \frac{\langle V^2 \rangle}{\hbar^2} \quad (45)$$

Il n'y a plus alors de probabilité de transition par unité de temps. En fait, l'expression (44) n'est autre que le premier terme du développement en puissances de V de la sinusoïde $[\sin(\Omega_1 \Delta t / 2)]^2 = [1 - \cos \Omega_1 \Delta t]/2$ qui décrit l'échange réversible d'énergie entre l'atome et le champ à la fréquence de Rabi Ω_1 définie par (45).

c) EFFET DE LA LARGEUR NATURELLE DU NIVEAU ATOMIQUE EXCITÉ

Considérons un atome isolé, sans rayonnement incident, dans une superposition linéaire des états $|a\rangle$ et $|b\rangle$. La valeur moyenne de d est alors non nulle et oscille à la fréquence ω_0 . Une telle oscillation ne peut cependant se poursuivre indéfiniment. Comme l'amplitude de probabilité de trouver l'atome dans l'état excité décroît exponentiellement avec une constante de temps $(\Gamma/2)^{-1}$, à cause de l'émission spontanée (Γ est la largeur naturelle du niveau excité b), le dipole moyen est amorti avec la même constante de temps. On peut montrer qu'il en est de même pour la fonction de corrélation du dipôle atomique, de sorte qu'une expression plus précise que (39.b) pour $G_A^*(t' - t'')$ est donnée par :

$$G_A^*(t' - t'') = |d_{ab}|^2 e^{-i\omega_0(t' - t'')} e^{-\Gamma|t' - t''|/2} \quad (46)$$

Il s'ensuit que la transformée de Fourier $\mathcal{G}_A(\omega)$ de $G_A^*(t' - t'')$ n'est pas une fonction delta infiniment étroite mais une lorentzienne de largeur Γ . Nous admettons ici le résultat (46) (*) et étudions maintenant comment un tel photodétecteur, de largeur Γ , répond à une excitation en raie large ($\Delta\omega_R \gg \Gamma$) ou étroite ($\Delta\omega_R \ll \Gamma$).

(i) Excitation en raie large : $\Delta\omega_R \gg \Gamma$

La situation est en fait la même que dans le paragraphe 4-b précédent. Dans l'expression (27), la fonction $G_R^N(t' - t'')$ décroît beaucoup plus vite avec $t' - t''$ que $G_A^*(t' - t'')$ de sorte que, dans les régions où $G_R^N(t' - t'')$ n'est pas nulle, l'exponentielle décroissante de (46) peut être remplacée par 1. L'introduction de Γ n'a donc aucun effet sur la probabilité d'excitation par unité de temps qui est toujours donnée par (41).

(ii) Excitation en raie étroite : $\Delta\omega_R \ll \Gamma$

C'est maintenant au contraire $G_A^*(t' - t'')$ qui décroît plus vite avec $t' - t''$ que $G_R^N(t' - t'')$. Dans les régions où $G_A^*(t' - t'')$ est non nulle,

(*) Ce résultat peut être établi à partir du théorème de régression quantique (voir compléments C_{IV} et A_V).

on peut considérer que $G_R^N(t' - t'')$ est purement monochromatique, de fréquence $\bar{\omega} = \omega_0$ (si l'on suppose que le spectre du rayonnement incident est toujours centré sur ω_0), et utiliser donc (43). Si l'on reporte (46) et (43) dans (27), il vient alors, si $\Delta t \gg \Gamma^{-1}$

$$\begin{aligned} w_{exc} &= \frac{P_{exc}(\Delta t)}{\Delta t} = \frac{|d_{ab}|^2 \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\Gamma}{2} |\tau|} d\tau \\ &= \frac{4 |d_{ab}|^2 \langle E^{(-)} E^{(+)} \rangle}{\hbar^2 \Gamma} = \frac{\Omega_1^2}{\Gamma} \end{aligned} \quad (47)$$

compte tenu de la définition (45) de Ω_1 .

Il est donc possible, même avec une excitation monochromatique, d'avoir une probabilité d'excitation de l'atome croissant linéairement avec le temps, et non plus quadratiquement, comme c'était le cas avec $\Gamma = 0$ (voir (44)). Nous justifions ainsi de manière quantitative la discussion du paragraphe B-4 du chapitre (voir également le paragraphe 3-b du complément C_I , et notamment la formule (32) de ce complément qui coïncide avec (47)).

Pour que le calcul perturbatif précédent soit valable, il faut bien sûr que $w_{exc}\Delta t \ll 1$, c'est-à-dire d'après (47)

$$\Delta t \ll \frac{\Gamma}{\Omega_1^2} \quad (48)$$

Par ailleurs, pour établir (47), nous avons supposé

$$\Gamma^{-1} \ll \Delta t \quad (49)$$

(pour que le ruban de la figure 3 puisse être considéré comme très étroit). Ces deux équations ne sont compatibles que si

$$\Omega_1 \ll \Gamma \quad (50)$$

c'est-à-dire si l'intensité incidente est assez faible. Dans le cas contraire, c'est-à-dire si $\Omega_1 \gg \Gamma$, Δt doit être pris beaucoup plus petit pour que le traitement perturbatif soit valable ($\Delta t \ll \Omega_1^{-1}$). La dernière exponentielle de (46) reste alors pratiquement égale à 1 et on retrouve le résultat (44) établi avec $\Gamma = 0$.

5. Signaux de photodétection double

a) CORRÉLATION ENTRE LES SIGNAUX DE DEUX PHOTODÉTECTEURS

Considérons deux atomes 1 et 2, dont les centres de masses sont supposés fixes en r_1 et r_2 , et qui sont soumis à un rayonnement incident de densité spectrale telle que les deux atomes puissent être considérés comme des photodéTECTEURS à bande large.

Sous l'effet de ce rayonnement incident, les deux atomes peuvent être ionisés. Nous nous proposons, dans ce dernier paragraphe, de calculer la probabilité $w_{II}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) dt_1 dt_2$ pour que l'atome 1 soit ionisé entre t_1 et $t_1 + dt_1$ et l'atome 2 entre t_2 et $t_2 + dt_2$. En général, une telle probabilité n'est pas simplement égale au produit de $w_I(\mathbf{r}_1, t_1) dt_1$ par $w_I(\mathbf{r}_2, t_2) dt_2$ où w_I est le taux d'ionisation d'un atome seul. La fonction w_{II} permet donc de caractériser les *corrélations* entre les ionisations produites par le même champ en deux points et à deux instants différents.

b) PRINCIPALES ÉTAPES DU CALCUL DE w_{II}

La démarche suivie est très analogue à celle des paragraphes 2 et 3 précédents.

L'hamiltonien H du problème est maintenant

$$H = H_{A1} + H_{A2} + H_R - d_1 E(\mathbf{r}_1) - d_2 E(\mathbf{r}_2) \quad (51)$$

où H_{Ai} et d_i sont l'hamiltonien et le dipôle de l'atome i ($i = 1, 2$).

Considérons l'amplitude $\langle c_1, c_2, \mu | \tilde{U}(\Delta t, 0) | a_1, a_2, \varphi_R \rangle$ pour qu'entre les instants 0 et Δt , chaque atome i soit passé de l'état fondamental a_i à l'état excité c_i , le champ passant de l'état $|\varphi_R\rangle$ à l'état $|\mu\rangle$. Comme il y a nécessairement deux interactions avec le champ, il faut prendre le terme d'ordre 2 du développement perturbatif de $\tilde{U}(\Delta t, 0)$ (voir formule (14) du complément A_I).

$$-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt'' \int_0^{\Delta t} dt' \langle c_1, c_2, \mu | \tilde{V}(t'') \tilde{V}(t') | a_1, a_2, \varphi_R \rangle \quad (52)$$

$t'' > t'$

On ne s'intéresse pas aux processus où le champ interagit deux fois avec le même atome. Comme $\tilde{V} = \tilde{V}_1 + \tilde{V}_2$, on peut donc, dans (52), remplacer $\tilde{V}(t'') \tilde{V}(t')$ par $\tilde{V}_2(t'') \tilde{V}_1(t') + \tilde{V}_1(t'') \tilde{V}_2(t')$, ce qui donne

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt'' \int_0^{\Delta t} dt' \langle c_2 | \tilde{d}_2(t'') | a_2 \rangle \langle c_1 | \tilde{d}_1(t') | a_1 \rangle \times \\ & \quad t'' > t' \\ & \times \langle \mu | \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_2, t'') \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_1, t') | \varphi_R \rangle + \text{termes analogues } 1 \rightleftharpoons 2 \end{aligned} \quad (53)$$

Les opérateurs \tilde{E} ont été remplacés par $\tilde{E}^{(+)}$, car la contribution des $\tilde{E}^{(-)}$, qui sont associés à des processus d'émission, est négligeable devant celle des $\tilde{E}^{(+)}$ pour des amplitudes où l'atome part de l'état fondamental (voir discussion à la fin du paragraphe 2-d plus haut).

Comme les deux opérateurs $\tilde{E}^{(+)}$ de (53) commutent (ils ne contiennent que des opérateurs d'annihilation qui commutent entre eux), ils peuvent être permuts (*). Intervertissons alors t' et t'' dans le deuxième terme de (53). Le regroupement des deux termes donne un résultat équivalent au premier sans aucune restriction d'ordre sur t' et t'' .

Pour obtenir la probabilité pour que les deux atomes soient excités entre 0 et Δt , il faut éléver au carré le module du premier terme de (53) (sans restriction d'ordre sur t' et t''), puis sommer sur μ et sur $c_1 \neq a_1$ et $c_2 \neq a_2$. Comme les termes $c_1 = a_1$ et $c_2 = a_2$ sont nuls par suite du caractère impair de d_1 et d_2 , on peut les rajouter et faire apparaître ainsi des relations de fermeture conduisant à l'expression suivante pour $P_{exc}(\Delta t)$

$$\begin{aligned} P_{exc}(\Delta t) = & \frac{1}{\hbar^4} \int_0^{\Delta t} dt'_1 \int_0^{\Delta t} dt''_1 \int_0^{\Delta t} dt'_2 \int_0^{\Delta t} dt''_2 \times \\ & \times \langle a_1 | \tilde{d}_1(t'_2) \tilde{d}_1(t'_1) | a_1 \rangle \langle a_2 | \tilde{d}_2(t''_2) \tilde{d}_2(t''_1) | a_2 \rangle \times \\ & \times \langle \varphi_R | \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{r}_1, t'_2) \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{r}_2, t''_2) \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_2, t''_1) \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_1, t'_1) | \varphi_R \rangle \end{aligned} \quad (54)$$

Il convient là encore de noter l'ordre normal des opérateurs champs qui figurent dans la fonction de corrélation d'ordre supérieur du champ apparaissant dans (54).

Le fait que les deux photodétecteurs soient à bande large entraîne que les deux fonctions de corrélation de d_1 et d_2 décroissent beaucoup plus vite avec $t'_1 - t'_2$ et $t''_1 - t''_2$ que la fonction de corrélation du champ. Un calcul analogue à celui du paragraphe 3 plus haut permet alors de transformer (54) en

$$\begin{aligned} P_{exc}(\Delta t) = & s_1 s_2 \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' \times \\ & \times \langle E^{(-)}(\mathbf{r}_1, t') E^{(-)}(\mathbf{r}_2, t'') E^{(+)}(\mathbf{r}_2, t'') E^{(+)}(\mathbf{r}_1, t') \rangle \end{aligned} \quad (55)$$

où s_1 et s_2 sont des facteurs de sensibilité donnés par des expressions analogues à (34).

Imaginons enfin qu'un obturateur masque le champ pour l'atome 1 à partir de t_1 et un autre pour l'atome 2 à partir de t_2 , t_1 et t_2 étant tous deux inférieurs à Δt . Le calcul précédent demeure valable à condition de remplacer V_1 et V_2 par $V_1 \theta(t_1 - t)$ et $V_2 \theta(t_2 - t)$ où θ est la fonction de Heaviside. La probabilité d'avoir l'atome 1 ionisé

(*) Voir cependant la remarque à la fin du paragraphe où l'on envisage un calcul plus précis tenant compte des atomes sources, à l'origine du rayonnement incident.

entre 0 et t_1 et l'atome 2 ionisé entre 0 et t_2 est donnée par une formule analogue à (55) où $\int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt''$ est remplacé par $\int_0^{t_1} dt' \int_0^{t_2} dt''$. Il suffit alors de dériver cette probabilité d'excitation par rapport à t_1 et à t_2 pour obtenir la probabilité élémentaire w_{II} définie dans le paragraphe 5-a plus haut et qui vaut donc

$$w_{II}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) = s_1 s_2 \langle \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{r}_1, t_1) \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{r}_2, t_2) \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_2, t_2) \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_1, t_1) \rangle \quad (56)$$

Notons enfin que, les opérateurs $\tilde{E}^{(-)}$ et $\tilde{E}^{(+)}$ ne commutant pas entre eux, w_{II} ne peut pas être écrit sous la forme d'une valeur moyenne d'un produit de deux intensités en \mathbf{r}_1, t_1 et \mathbf{r}_2, t_2

$$w_{II}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) \neq s_1 s_2 \langle I(\mathbf{r}_1, t_1) I(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle \quad (57)$$

où

$$I(\mathbf{r}_i, t_i) = \tilde{E}^{(-)}(\mathbf{r}_i, t_i) \tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_i, t_i) \quad (i = 1, 2)$$

Cette non commutation de $\tilde{E}^{(-)}$ et $\tilde{E}^{(+)}$ est à l'origine d'un certain nombre d'effets quantiques observables sur les signaux de photodétection double (*).

Remarque

Dans tout ce qui précède, nous avons supposé le rayonnement incident libre. Plus précisément, en l'absence d'atomes photodétecteurs, les hamiltoniens (1) et (51) se réduisent à H_R . Dans certains cas, il peut être intéressant d'inclure les sources du rayonnement incident, si l'on veut par exemple relier les signaux de détection fournis par les photodétecteurs à des fonctions de corrélation du dipole de l'atome émetteur (c'est ce que nous faisons par exemple dans le paragraphe D-1 du chapitre V). Dans ce cas, H_R doit être remplacé dans (1) et (51) par

$$H_R + H_S + V_{SR} \quad (58)$$

où H_S est l'hamiltonien de l'atome source et V_{SR} l'interaction entre le rayonnement et l'atome source. Le calcul des probabilités d'excitation des atomes photodétecteurs est très analogue à celui fait dans ce complément. Toutefois, il faut maintenant passer en représentation d'interaction par rapport à $H_A + H_R + H_S + V_{SR}$ et non plus par rapport à $H_A + H_R$. Les opérateurs de champ libre $\tilde{E}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ de ce complément doivent être alors remplacés par les composantes de fréquence positive et négative $E^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ de l'opérateur champ $E(\mathbf{r}, t)$, couplé à l'atome source, et pris dans le point de vue de Heisenberg vis-à-vis de l'hamiltonien (58).

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes – Introduction à l'Electrodynamique Quantique », complément A_{III}.

Les signaux de photodétection simple étudiés dans les paragraphes 3 et 4 ci-dessus gardent la même forme, à condition de remplacer $\tilde{E}^{(\pm)}(\mathbf{r},t)$ par $E^{(\pm)}(\mathbf{r},t)$. Ainsi, le taux de comptage simple fourni par un photodétecteur à bande large est proportionnel à $\langle E^{(-)}(\mathbf{r},t)E^{(+)}(\mathbf{r},t) \rangle$. Un photodétecteur à bande étroite mesure la densité spectrale du champ à sa fréquence ω_0 , c'est-à-dire la transformée de Fourier de $\langle E^{(-)}(\mathbf{r},t')E^{(+)}(\mathbf{r},t'') \rangle$, évaluée en ω_0 .

Le calcul du taux de comptage double exige un peu plus de précautions. Ainsi, dans l'expression (53), les opérateurs $E^{(+)}(\mathbf{r}_1,t')$ et $E^{(+)}(\mathbf{r}_2,t'')$, qui remplacent $\tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_1,t')$ et $\tilde{E}^{(+)}(\mathbf{r}_2,t'')$, ne commutent plus entre eux et il n'est plus possible de regrouper les deux termes de (53) en une seule intégrale double. Il faut évaluer séparément les deux termes et bien respecter l'ordre temporel $t'' > t'$ dans les deux produits $E^{(+)}(\mathbf{r}_2,t'')E^{(+)}(\mathbf{r}_1,t')$ et $E^{(+)}(\mathbf{r}_1,t'')E^{(+)}(\mathbf{r}_2,t')$. Cependant, dans la suite du calcul, un seul de ces deux produits contribue au taux de comptage double $w_{II}(\mathbf{r}_1,t_1 ; \mathbf{r}_2,t_2)$, le premier si $t_2 > t_1$, le second si $t_1 > t_2$. Finalement, si $t_2 > t_1$, la formule (56) reste valable, à condition de remplacer les $\tilde{E}^{(\pm)}(\mathbf{r},t)$ par $E^{(\pm)}(\mathbf{r},t)$. Si par contre $t_1 > t_2$, il faut intervertir \mathbf{r}_1, t_1 et \mathbf{r}_2, t_2 . En présence de sources, les fonctions de corrélation d'ordre supérieur du champ qui apparaissent dans les signaux de photodétection doivent donc être rangées, non seulement avec les composantes de fréquence positive à droite des composantes de fréquence négative, mais également avec les temps croissant de l'extérieur vers l'intérieur.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

Glauber, Nussenzweig.

COMPLÉMENT B_{II}

**CORRECTIONS RADIATIVES
DANS LE POINT DE VUE DE PAULI-FIERZ**

Dans la partie E, nous avons étudié des processus au cours desquels des photons sont émis de façon transitoire, puis réabsorbés. Ces processus se traduisent par des modifications des propriétés effectives des systèmes émetteurs, atomes ou particules : ce sont les corrections radiatives. Une particule, un atome, sont ainsi accompagnés en permanence d'un nuage de photons virtuels. Ces photons décrivent l'état du champ transverse en présence de la particule ou de l'atome. En effet, en présence de charges, le champ électromagnétique est la somme du champ coulombien des charges et du champ transverse (voir appendice, § 1). Le champ coulombien n'est donc qu'une première approximation du champ réel. Classiquement, le champ électromagnétique qui accompagne une particule en mouvement uniforme comporte, en plus du champ coulombien, un champ magnétique linéaire en v/c , et une correction au champ électrique coulombien en v^2/c^2 . Ces deux derniers champs dérivent du potentiel vecteur transverse. Quantitativement, le champ transverse ne décrit donc pas uniquement le rayonnement produit par les particules (qui d'ailleurs est nul pour une particule en mouvement uniforme), le rayonnement incident, ou les fluctuations du vide. Il décrit également la partie du champ dépendant de la vitesse des particules et qui leur est en quelque sorte liée, tant que cette vitesse ne change pas. C'est ce champ que décrit le nuage de photons virtuels.

Il est alors tentant d'essayer de prendre comme états non perturbés du système champ + particules de nouveaux états qui incluent la partie du champ transverse qui est liée aux particules. Plus précisément, il s'agit de trouver une transformation unitaire telle que, dans les nouveaux états non perturbés représentant les particules en présence du « nouveau vide », chaque particule soit accompagnée du champ transverse associé à sa vitesse. La transformation que Pauli et Fierz (*) ont introduite pour étudier l'émission de rayonnement de basse fréquence au cours d'une collision électronique (problème dit de la « divergence infrarouge ») réalise cet objectif sur une partie du spectre des modes du champ. Elle n'est en effet simple que dans la mesure où elle est limitée aux modes de grandes longueurs d'onde.

Dans le paragraphe 1, nous déterminons le champ transverse lié à une

(*) W. Pauli and M. Fierz, Nuovo Cimento **15**, 167 (1938).

particule classique et établissons l'expression de la transformation de Pauli-Fierz pour une particule quantique localisée. L'effet de cette transformation sur les observables du champ et de la particule, et en particulier sur l'hamiltonien, est analysé dans le paragraphe 2. Nous montrons ensuite (§ 3) que le nouvel hamiltonien contient explicitement la correction de masse δm_α rencontrée dans la partie E de ce chapitre, et une correction à l'énergie potentielle permettant de comprendre physiquement le déplacement de Lamb. Un autre résultat important est que les particules ne sont couplées au nouveau champ transverse qu'à l'ordre 2 en q_α et seulement si elles sont accélérées. Si elle est intéressante pour discuter des corrections radiatives à l'approximation des grandes longueurs d'onde, la transformation de Pauli-Fierz n'est pas simplement généralisable. Ses limitations sont discutées à la fin du complément.

1. La transformation de Pauli-Fierz

a) HYPOTHÈSES SIMPLIFICATRICES - POSITION DU PROBLÈME

Pour simplifier au maximum les calculs et mettre l'accent sur les idées physiques, nous considérons une seule particule α , localisée au voisinage de l'origine par un potentiel extérieur $U_e(\mathbf{r})$. De plus, nous ne tiendrons compte que des modes dont le vecteur d'onde a un module inférieur à une borne k_M telle que les variations spatiales des champs correspondants soient négligeables sur l'extension a_0 des fonctions d'onde de la particule dans le potentiel $U_e(\mathbf{r})$. L'approximation des grandes longueurs d'onde est alors applicable à tous les modes considérés, de sorte que l'interaction de la particule avec le champ transverse sera caractérisée par $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ (le développement de \mathbf{A} est limité aux modes $|\mathbf{k}| < k_M$). L'hamiltonien en jauge de Coulomb s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0})]^2 + \varepsilon_{Coul}^\alpha + q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha) + \\ + \int_{<} d^3k \sum_e \hbar\omega \left[a_e^+(\mathbf{k}) a_e(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] \quad (1)$$

où le symbole $<$ signifie que l'intégrale est limitée à $|\mathbf{k}| < k_M$. Les opérateurs $a_e(\mathbf{k})$ et $a_e^+(\mathbf{k})$ caractérisent le champ transverse *total*.

Notre objectif est de trouver une transformation unitaire T , permettant de séparer le champ transverse lié à la particule du champ total, et conduisant à une nouvelle formulation de l'électrodynamique dans laquelle les états libres de la particule incluent ce champ transverse. Dans la nouvelle représentation, les opérateurs $a_e(\mathbf{k})$ et $a_e^+(\mathbf{k})$ doivent caractériser le champ transverse qui *n'est pas lié* à la particule. La

première étape d'un tel programme consiste donc à déterminer le champ transverse lié à une particule.

b) CHAMP TRANSVERSE LIÉ À UNE PARTICULE CLASSIQUE

Considérons la particule α en mouvement uniforme, avec une vitesse v_α . Le champ qui l'accompagne est bien connu en électrodynamique classique. Il dérive par exemple des potentiels retardés (*):

$$\Phi_P(\mathbf{r},t) = \int d^3r' \frac{\rho \left(\mathbf{r}',t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} \right)}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.a)$$

$$\mathbf{A}_P(\mathbf{r},t) = \int d^3r' \frac{\mathbf{j} \left(\mathbf{r}',t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} \right)}{4\pi\epsilon_0 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.b)$$

$\rho(\mathbf{r}',t')$ et $\mathbf{j}(\mathbf{r}',t')$ étant les densités de charge et de courant associées à la particule α . Pour une particule arrêtée ($\mathbf{v}_\alpha = 0$), $\Phi_P(\mathbf{r})$ se réduit au potentiel coulombien et \mathbf{A}_P est nul. Pour une particule en mouvement, les équations (2) donnent les potentiels de Liénard-Wiechert, dont le développement à l'ordre 1 en \mathbf{v}_α s'écrit :

$$\Phi_P(\mathbf{r},t) = \frac{q_\alpha}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|} + \dots \quad (3.a)$$

$$\mathbf{A}_P(\mathbf{r},t) = \frac{q_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{4\pi\epsilon_0 c^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|} + \dots \quad (3.b)$$

où \mathbf{r}_α est la position de la particule à l'instant t . Le premier terme de (3.b) n'est autre que le potentiel vecteur utilisé habituellement en électrocinétique pour décrire, à la limite quasi-statique, les effets magnétiques. La transformation de Pauli-Fierz néglige les termes d'ordre supérieur en \mathbf{v}_α et ne prend en considération que ces premières corrections au champ coulombien, en assimilant de plus \mathbf{v}_α à $\mathbf{p}_\alpha/m_\alpha$. Cette dernière approximation revient à négliger le deuxième terme de l'expression $[\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]/m_\alpha$ de \mathbf{v}_α , qui donnerait une contribution en q_α^2 . Nous calculons donc le champ lié à la particule au premier ordre en \mathbf{p}_α et q_α . Les potentiels (3.a) et (3.b) ne satisfont pas la jauge de Coulomb, puisque Φ_P diffère du potentiel coulombien par des termes d'ordre 2 en v_α/c ne figurant pas explicitement dans (3.a) et que \mathbf{A}_P a une divergence non nulle. Les potentiels qui décrivent le même champ en jauge de Coulomb sont, d'une part le potentiel

(*) Jackson, chapitre 6, Landau et Lifchitz, Théorie du Champ, §§ 62 et 63 ; voir aussi « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 4 du complément C_I.

coulombien, et d'autre part, la partie transverse de \mathbf{A}_P (puisque un changement de jauge ne modifie pas la partie transverse du potentiel vecteur et que le potentiel vecteur est purement transverse en jauge de Coulomb -voir appendice, §§ 1-b et 1-c). Pour obtenir la partie transverse du potentiel vecteur (3.b), il suffit de l'écrire sous forme d'une transformée de Fourier et de ne garder, pour chaque valeur de \mathbf{k} , que la projection du champ sur le plan perpendiculaire à \mathbf{k} . On obtient ainsi :

$$\mathbf{A}_{P\perp}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\epsilon} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha} \epsilon_0 c^2} \frac{\epsilon(\epsilon, \mathbf{p}_{\alpha})}{k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})} \quad (4)$$

ou encore

$$\mathbf{A}_{P\perp}(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_{\epsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega (2\pi)^3}} [\beta_{\epsilon}(\mathbf{k}) \epsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + c.c.] \quad (5)$$

avec

$$\beta_{\epsilon}(\mathbf{k}) = \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha} \omega} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_0 \hbar \omega (2\pi)^3}} \epsilon \cdot \mathbf{p}_{\alpha} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \quad (6)$$

La quantité $\beta_{\epsilon}(\mathbf{k})$ est donc la valeur de la variable normale décrivant comment le mode (\mathbf{k}, ϵ) est excité par le mouvement de la particule. Il faut noter que l'état du système champ + particule caractérisé par \mathbf{p}_{α} et les $\beta_{\epsilon}(\mathbf{k})$ est stationnaire : en l'absence de perturbation extérieure, le mouvement de translation uniforme de la particule et du champ associé persiste indéfiniment.

Remarque

Au lieu de partir des potentiels retardés, puis de revenir en jauge de Coulomb, nous aurions pu déterminer directement l'expression de $\mathbf{A}_{P\perp}$ en intégrant les équations du mouvement des variables normales du champ (équation (18.b) de l'appendice) en présence du courant associé à la particule en mouvement uniforme. C'est ce qui est fait dans l'exercice 9. A l'ordre le plus bas en q_{α} et \mathbf{p}_{α} , on retrouve alors (6).

Dans le problème considéré ici, la particule se déplace dans le potentiel $U_{\epsilon}(\mathbf{r})$ et son mouvement n'est pas uniforme. Le potentiel $\mathbf{A}_{P\perp}(\mathbf{r})$ ne décrit donc pas le champ transverse exact autour de la particule, même à l'approximation considérée. C'est le champ qui devrait accompagner le mouvement de la particule s'il était uniforme. Il correspond donc à l'état stationnaire du système champ + particule « tangent », à cet instant, à son mouvement réel. Si l'on ne connaît que les valeurs des variables dynamiques \mathbf{r}_{α} et \mathbf{p}_{α} de la particule à l'instant t , la somme du champ coulombien et de celui qui dérive de

$\mathbf{A}_{P\perp}(\mathbf{r})$ représente la meilleure approximation du champ réel que l'on puisse construire à partir de ces deux données.

Comme nous ne considérons ici que les modes pour lesquels l'approximation des grandes longueurs est valable, il convient de faire $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha = 0$ dans (4) et (6). Il vient donc finalement

$$\beta_\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{q_\alpha}{m_\alpha \omega} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_0 \hbar \omega (2\pi)^3}} \epsilon \cdot \mathbf{p}_\alpha \quad (7)$$

et (*)

$$\mathbf{A}_P(\mathbf{r}) = \int_{<} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_\epsilon \frac{q_\alpha}{m_\alpha \epsilon_0 c^2} \frac{\epsilon (\epsilon \cdot \mathbf{p}_\alpha)}{k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (8)$$

c) DÉTERMINATION DE LA TRANSFORMATION DE PAULI-FIERZ

Maintenant que nous avons identifié le champ transverse lié à la particule, nous pouvons revenir à la théorie quantique. Nous utilisons le point de vue de Schrödinger où les opérateurs sont indépendants du temps. En théorie quantique, l'équation (7) définit un opérateur $\beta_\epsilon(\mathbf{k})$ relatif à la particule ($\beta_\epsilon(\mathbf{k})$ ne dépend que de la variable dynamique \mathbf{p}_α de la particule qui est représentée par l'opérateur $-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_\alpha}$).

Nous cherchons une transformation unitaire T qui soustrait du champ transverse total le champ transverse lié à la particule. Pour cela, il suffit qu'elle translate chaque opérateur $a_\epsilon(\mathbf{k})$ de la quantité $\beta_\epsilon(\mathbf{k})$ déterminée précédemment :

$$T a_\epsilon(\mathbf{k}) T^+ = a_\epsilon(\mathbf{k}) + \beta_\epsilon(\mathbf{k}) \quad (9)$$

Nous verrons dans le paragraphe suivant qu'une telle transformation permet bien de soustraire le champ transverse lié à la particule du champ transverse total. Auparavant, donnons la forme explicite de T .

Comme $\beta_\epsilon(\mathbf{k})$ ne dépend que d'un seul opérateur de particule, \mathbf{p}_α , et que $\beta_\epsilon(\mathbf{k})$ commute avec tous les opérateurs de rayonnement, l'équation (9) peut être considérée comme définissant une simple translation pour les a et a^+ . Or, un tel opérateur de translation est bien connu (voir formules (66) et (67) de l'appendice). Il s'écrit

$$T = \exp \left\{ \int_{<} d^3k \sum_\epsilon [\beta_\epsilon^+(\mathbf{k}) a_\epsilon(\mathbf{k}) - \beta_\epsilon(\mathbf{k}) a_\epsilon^+(\mathbf{k})] \right\} \quad (10)$$

(*) Pour simplifier les notations, l'indice \perp sera désormais omis dans $\mathbf{A}_{P\perp}$.

Ayant ainsi déterminé la transformation, nous allons maintenant déterminer la correspondance entre grandeurs physiques et opérateurs mathématiques dans le nouveau point de vue, ainsi que le nouvel hamiltonien.

2. Les observables dans le nouveau point de vue

a) TRANSFORMATION DES CHAMPS TRANSVERSES

Dans le point de vue de Coulomb, noté (1), les opérateurs mathématiques

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \sum_{\epsilon} \mathcal{A}_{\omega} [a_{\epsilon}(\mathbf{k}) \epsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) \epsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (11.a)$$

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \sum_{\epsilon} i \mathcal{E}_{\omega} [a_{\epsilon}(\mathbf{k}) \epsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) \epsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (11.b)$$

représentent respectivement le potentiel vecteur transverse (total) et le champ électrique transverse (voir appendice, § 1-f)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (12.a)$$

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\perp}^{(1)}(\mathbf{r}) \quad (12.b)$$

L'opérateur représentant le potentiel vecteur transverse total dans le nouveau point de vue, noté (2), est le transformé de $\mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{r})$ par T et s'écrit :

$$\mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) = T \mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{r}) T^+ = T \mathbf{A}(\mathbf{r}) T^+ \quad (13)$$

En utilisant l'expression (11.a) de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et les formules (9) et (7), on obtient alors :

$$\mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_P(\mathbf{r}) \quad (14)$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est, de nouveau, l'opérateur mathématique (11.a), et où $\mathbf{A}_P(\mathbf{r})$ est donné par (8), \mathbf{p}_{α} étant considéré maintenant comme un opérateur. Comme $\mathbf{A}_P(\mathbf{r})$ ne dépend que de \mathbf{p}_{α} , et que \mathbf{p}_{α} commute avec T , $\mathbf{A}_P(\mathbf{r})$ est invariant par T et représente donc, dans les deux points de vue, la même grandeur physique, à savoir le champ transverse lié à la particule :

$$\mathbf{A}_P(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_P^{(1)}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_P^{(2)}(\mathbf{r}) \quad (15)$$

La combinaison de (14) et (15) donne alors :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) - \mathbf{A}_P^{(2)}(\mathbf{r}) = \delta \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) \quad (16)$$

L'opérateur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ décrit donc, dans le nouveau point de vue, la

différence entre le champ transverse total $\mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r})$ et le champ transverse lié à la particule $\mathbf{A}_p^{(2)}(\mathbf{r})$, différence que nous avons notée $\delta \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r})$. Le résultat obtenu est donc conforme au but que nous nous étions fixés en introduisant la transformation T .

De façon analogue, le champ électrique transverse est représenté dans le nouveau point de vue par :

$$\mathbf{E}_{\perp}^{(2)}(\mathbf{r}) = T \mathbf{E}_{\perp}^{(1)}(\mathbf{r}) T^+ = T \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) T^+ \quad (17)$$

d'après (12.b). En utilisant l'expression (11.b) de $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r})$ et l'équation (9), on peut vérifier que

$$T \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) T^+ = \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

de sorte que l'opérateur \mathbf{E}_{\perp} représente toujours le champ électrique transverse dans le nouveau point de vue :

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\perp}^{(2)}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

Un tel résultat n'est pas surprenant. L'écart du champ électrique par rapport au champ coulombien est en v_{α}^2/c^2 et notre calcul de $\beta_{\epsilon}(\mathbf{k})$ ne prend en compte que les termes linéaires en \mathbf{v}_{α} .

b) TRANSFORMATION DES VARIABLES DYNAMIQUES DES PARTICULES

Revenons à l'expression (10) de T . Compte tenu de (7), il est possible d'écrire (10) sous la forme :

$$T = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right] \quad (20)$$

où $\mathbf{Z}(\mathbf{r})$ est un champ quantique (*) défini par :

$$\mathbf{Z}(\mathbf{r}) = \int_{<} d^3k \sum_{\epsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega(2\pi)^3}} \left[\epsilon \frac{a_{\epsilon}(\mathbf{k})}{i\omega} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \epsilon \frac{a_{\epsilon}^+(\mathbf{k})}{i\omega} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (21)$$

Etudions maintenant comment se transforme la position de la particule qui, dans le point de vue de Coulomb, est représentée par l'opérateur \mathbf{r}_{α} , multiplication par \mathbf{r}_{α} :

$$\mathbf{r}_{\alpha}^{(1)} = \mathbf{r}_{\alpha} \quad (22)$$

Comme l'opérateur de particule \mathbf{p}_{α} commute avec l'opérateur de champ

(*) Une transformation analogue peut être introduite pour une particule interagissant avec un champ extérieur classique. Voir W.C. Henneberger, Phys. Rev. Lett. **21**, 838 (1968), ou encore « Photons et Atomes – Introduction à l'Electrodynamique Quantique », § B-4 du chapitre IV.

$Z(0)$, (20) est également un opérateur de translation pour r_α , et il vient :

$$r_\alpha^{(2)} = T r_\alpha^{(1)} T^+ = r_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} Z(0) \quad (23)$$

Le dernier terme de (23), que nous noterons ξ_α , a la même forme dans les deux points de vue puisque $Z(0)$ commute avec lui-même :

$$\xi_\alpha = \frac{q_\alpha}{m_\alpha} Z(0) = \xi_\alpha^{(1)} = \xi_\alpha^{(2)} \quad (24)$$

La signification physique de ξ_α s'obtient en calculant, à l'ordre 1 en q_α , sa dérivée seconde par rapport au temps à l'aide de l'équation de Heisenberg. A l'ordre le plus bas en q_α , on peut remplacer l'hamiltonien total par H_R pour évaluer (dans le point de vue (1)) la vitesse de variation de $Z(0)$. Chaque dérivation temporelle de $a_\epsilon(k)$ revient alors à multiplier $a_\epsilon(k)$ par $-i\omega$. On en déduit que $\ddot{Z} = E_\perp$ et par suite que :

$$m_\alpha \ddot{\xi}_\alpha = q_\alpha E_\perp(0) + \text{termes d'ordres supérieurs en } q_\alpha \quad (25)$$

La variable ξ_α représente donc le mouvement qu'aurait la particule si elle était soumise au seul champ transverse (à l'ordre 1 en q_α) : c'est la réponse linéaire de la particule libre à $E_\perp(0)$. Le report de (24) dans (23) donne alors :

$$r_\alpha = r_\alpha^{(2)} - \xi_\alpha^{(2)} \quad (26)$$

et montre que, dans le point de vue (2), l'opérateur r_α représente la « position moyenne » de la particule autour de laquelle cette particule effectue le mouvement de vibration $\xi_\alpha^{(2)}$. Nous noterons cette position moyenne $r_\alpha^{(2)}$:

$$r_\alpha = r_\alpha^{(2)} \quad (27)$$

Considérons maintenant l'autre variable dynamique p_α . Comme il commute avec T , l'opérateur p_α représente la même grandeur physique dans les deux points de vue :

$$p = p_\alpha^{(1)} = p_\alpha^{(2)} \quad (28)$$

Nous verrons plus loin, une fois que nous aurons établi l'expression de l'hamiltonien $H^{(2)}$, que $p_\alpha^{(2)}$ est simplement relié à la « vitesse moyenne » $[r_\alpha^{(2)}, H^{(2)}]/i\hbar$.

Il est intéressant à ce stade de rapprocher l'une de l'autre les équations (16) et (26) donnant le sens physique des opérateurs $A(r)$ et r_α dans le nouveau point de vue. Il apparaît alors que la transformation T revient à tenir compte à l'avance de la « réponse linéaire » de chacun des deux systèmes couplés (la particule ou le champ transverse) à l'autre. L'équation (16) exprime en effet que le champ

transverse, produit à l'ordre 1 en q_α par la particule, est soustrait du champ total, alors que (26) exprime que le déplacement de la particule, produit à l'ordre 1 en q_α par le champ, est soustrait de la position instantanée. Comme, dans le nouveau point de vue, chaque opérateur d'un système décrit l'écart de la grandeur physique correspondante par rapport à sa réponse linéaire à l'autre système, on devine aisément que le nouvel hamiltonien ne doit plus contenir de termes d'interaction linéaire en q_α entre la particule et le champ transverse. C'est ce que nous allons vérifier maintenant en calculant $H^{(2)}$.

c) EXPRESSION DU NOUVEL HAMILTONIEN

L'hamiltonien $H^{(1)}$ en jauge de Coulomb est l'opérateur H écrit en (1). On obtient donc, en utilisant (13), (14), (28), (23) et (9) :

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= TH^{(1)}T^+ = THT^+ = \\ &= \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0}) - q_\alpha \mathbf{A}_P(\mathbf{0})]^2 + \varepsilon_{Coul}^\alpha + q_\alpha U_e \left(\mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right) \\ &\quad + \int_{<} d^3k \sum_\epsilon \hbar\omega \left[(a_\epsilon^+(\mathbf{k}) + \beta_\epsilon^+(\mathbf{k})) (a_\epsilon(\mathbf{k}) + \beta_\epsilon(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (29)$$

Dans le premier terme de (29), apparaît $\mathbf{A}_P(\mathbf{0})$, qui s'écrit, compte tenu de (8) :

$$\mathbf{A}_P(\mathbf{0}) = \int_{<} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_\epsilon \frac{q_\alpha}{m_\alpha \epsilon_0 c^2} \frac{\epsilon(\epsilon \cdot \mathbf{p}_\alpha)}{k^2} \quad (30)$$

La sommation sur les polarisations transverses ϵ (voir formule (54) du complément A_I), puis l'intégrale sur la direction et le module de \mathbf{k} ne présentent pas de difficulté et donnent :

$$q_\alpha \mathbf{A}_P(\mathbf{0}) = \mathbf{p}_\alpha \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \quad (31)$$

où la masse δm_α , qui est d'ordre 2 en q_α , vaut :

$$\delta m_\alpha = \frac{q_\alpha^2 k_M}{3\epsilon_0 \pi^2 c^2} \quad (32)$$

Le premier terme de (29) est donc, compte tenu de (31), égal à :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m_\alpha} \left[\mathbf{p}_\alpha \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \right) - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0}) \right]^2 = \\ &= \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \right)^2 - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \right) \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} (\mathbf{A}(\mathbf{0}))^2 \end{aligned} \quad (33.a)$$

Comme, d'après (32), δm_α est d'ordre 2 en q_α , les termes en $q_\alpha \delta m_\alpha$ et δm_α^2 de (33.a) sont respectivement d'ordre 3 et 4 en q_α , de sorte qu'il est possible, à l'ordre 2 inclus en q_α , de les négliger et d'écrire le premier terme de (29) sous la forme (*):

$$\frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} - \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} \frac{2\delta m_\alpha}{m_\alpha} - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} (\mathbf{A}(\mathbf{0}))^2 \quad (33.b)$$

Considérons maintenant la dernière intégrale de (29). Elle donne naissance à trois types de termes. Le premier, en $a^+ a$, a la forme d'un hamiltonien de champ libre. Le second, linéaire en a et a^+ , de même qu'en β et en β^+ , n'est autre, compte tenu de (7) et de (11.a) que $q_\alpha \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})/m_\alpha$. Enfin, le troisième, qui fait intervenir $\beta^+ \beta$, est quadratique en \mathbf{p}_α et vaut $(\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha)(\delta m_\alpha/m_\alpha)$. Le troisième terme de (29) est donc égal à :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3 k \sum_e \hbar \omega \left[a_e^+(\mathbf{k}) a_e(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right] + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \quad (33.c)$$

Lorsqu'on ajoute (33.b) et (33.c), les termes en $\mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})$ se compensent exactement ; le deuxième terme de (33.b) et le troisième terme de (33.c) se combinent pour donner $-(\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha)(\delta m_\alpha/m_\alpha)$. Finalement, à l'ordre 2 en q_α pour le terme d'énergie cinétique, $H^{(2)}$ se met sous la forme :

$$H^{(2)} = H'_\alpha + H_R \quad (34.a)$$

où

$$H'_\alpha = \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \right) + q_\alpha U_e \left(\mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right) + \varepsilon_{Coul}^\alpha + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} (\mathbf{A}(\mathbf{0}))^2 \quad (34.b)$$

et où

$$H_R = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 k \hbar \omega \sum_e \left(a_e^+(\mathbf{k}) a_e(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right) \quad (34.c)$$

(*) Il est possible bien sûr de conserver tous les termes de (33.a). Si l'on modifie en plus légèrement la masse m_α qui apparaît dans l'expression (20) de T , on peut alors obtenir pour $H^{(2)}$ une expression qui, tout en restant compacte, est exacte à tous les ordres en q_α (voir remarque (i) à la fin du paragraphe suivant g).

3. Discussion physique

a) CORRECTION DE MASSE

Pour interpréter le premier terme de (34.b), commençons par analyser le sens physique de \mathbf{p}_α . Dans le point de vue de Heisenberg, l'équation du mouvement de \mathbf{r}_α s'écrit :

$$\dot{\mathbf{r}}_\alpha = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}_\alpha, H^{(2)}] = \frac{\mathbf{p}_\alpha}{m_\alpha} \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha} \right) \simeq \frac{\mathbf{p}_\alpha}{m_\alpha^*} \quad (35)$$

où

$$m_\alpha^* = m_\alpha + \delta m_\alpha \quad (36)$$

(la dernière égalité de (35) est valable à l'ordre 2 en q_α). Compte tenu de (27) et (28), l'équation (35) donne alors :

$$\mathbf{p}_\alpha^{(2)} = m_\alpha^* \dot{\mathbf{r}}_\alpha^{(2)} \quad (37)$$

et exprime que $\mathbf{p}_\alpha^{(2)}$ est la quantité de mouvement associée à la position moyenne de la particule, la masse m_α étant remplacée par m_α^* . Le premier terme de (34.b), qui peut s'écrire $\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha^*$, représente donc l'énergie cinétique associée au mouvement moyen de la particule.

La correction de masse δm_α , donnée en (32), représente la contribution des modes de grande longueur d'onde à la masse électromagnétique de la particule. En revenant aux termes de l'hamiltonien de Coulomb qui sont à l'origine de la correction $-(\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha)(\delta m_\alpha/m_\alpha)$ apparaissant dans le premier terme de (34.b), on constate que cette correction, globalement négative, est la somme de deux contributions : l'énergie du champ transverse lié à la particule (terme en $\beta^+ \beta$ de la dernière intégrale de (29)), qui est positive, et l'énergie d'interaction de la particule avec son propre champ transverse, qui est négative et deux fois plus grande en module que la précédente (terme en $-2\mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}_P(\mathbf{0})$ du premier terme de (29)). La correction d'énergie cinétique en δm_α représente donc l'énergie propre et l'énergie d'interaction du champ transverse lié à la particule. C'est également cette correction d'énergie qui a été étudiée directement dans le point de vue (1) dans le chapitre (formule (E.4)).

Remarque

Revenons sur le calcul de $H^{(2)}$ présenté au paragraphe 1-f plus haut et supposons que l'on change m_α en $m_\alpha^* = m_\alpha + \delta m_\alpha$ dans l'expression (20) de T

$$T' = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right] \quad (20')$$

Pour obtenir la transformée du terme d'énergie cinétique de $H^{(1)}$ par T' , il suffit alors de remplacer dans le crochet de la première ligne de (33.a) $\delta m_\alpha/m_\alpha$ par $\delta m_\alpha/m_\alpha^*$, ce qui conduit à remplacer (33.a) par

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m_\alpha} \left[\mathbf{p}_\alpha \left(1 - \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha^*} \right) - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0}) \right]^2 &= \frac{1}{2m_\alpha} \left[\mathbf{p}_\alpha \frac{m_\alpha}{m_\alpha^*} - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0}) \right]^2 = \\ &= \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha^*} \frac{m_\alpha}{m_\alpha^*} - \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} (\mathbf{A}(\mathbf{0}))^2 \end{aligned} \quad (33'.a)$$

De même, pour obtenir la transformée du terme H_R de $H^{(1)}$, il suffit de remplacer m_α par m_α^* dans (33.c), ce qui donne

$$H_R + \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*} \mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha^*} \frac{\delta m_\alpha}{m_\alpha^*} \quad (33'.c)$$

Lorsqu'on ajoute (33'.a) et (33'.c), les termes en $\mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})$ se compensent toujours exactement et les termes en $\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha^*$ se combinent pour donner exactement $\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha^*$. Finalement, on obtient pour $H^{(2)} = T' H^{(1)} T'^+$ une expression compacte qui généralise (34) et qui reste valable à tous les ordres en q_α

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= T' H^{(1)} T'^+ \\ &= \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha^*} + q_\alpha U_e \left(\mathbf{r}_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha^*} \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \right) + \varepsilon_{Coul}^\alpha + H_R + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha} (\mathbf{A}(\mathbf{0}))^2 \end{aligned} \quad (34')$$

L'expression (34') de $H^{(2)}$ est particulièrement intéressante pour l'étude de certains problèmes comme celui de la « catastrophe infrarouge » (voir exercice 9). En effet, si les éléments de matrice du second terme de (34') sont calculables exactement, on peut étudier des processus physiques, comme la diffusion d'une particule chargée par un potentiel, au premier ordre vis-à-vis du potentiel extérieur, mais à tous les ordres vis-à-vis du couplage avec le champ transverse.

b) NOUVEL HAMILTONIEN D'INTERACTION ENTRE PARTICULE ET CHAMP TRANSVERSE

C'est uniquement dans le second terme de (34.b), qui peut s'écrire $q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha + \xi_\alpha)$ compte tenu de (24), qu'apparaissent à la fois des variables des particules (\mathbf{r}_α) et du champ transverse ($\mathbf{Z}(\mathbf{0})$). Comme nous l'avions deviné à la fin du paragraphe 2b, il n'y a plus de terme d'interaction linéaire en q_α entre particule et champ transverse. Le terme d'ordre le plus bas s'obtient en développant $q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha + \xi_\alpha)$ en puissances de ξ_α et s'écrit, d'après (24) :

$$q_\alpha \xi_\alpha \cdot \nabla U_e(\mathbf{r}_\alpha) = q_\alpha \mathbf{Z}(\mathbf{0}) \cdot \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \nabla U_e(\mathbf{r}_\alpha) \quad (38)$$

Il est bien d'ordre 2 en q_α , mais c'est un terme à un photon car $\mathbf{Z}(\mathbf{0})$ est, d'après (21), une superposition linéaire des a_j et a_j^+ . Le terme $q_\alpha \nabla U_e(\mathbf{r}_\alpha)/m_\alpha$, qui apparaît dans (38), est, au signe près, le quotient par m_α de la force électrique extérieure agissant sur la particule, et évaluée en \mathbf{r}_α qui est la position moyenne de cette particule. L'hamiltonien d'interaction (38) décrit donc le couplage du champ transverse $\mathbf{Z}(\mathbf{0})$ avec l'accélération du mouvement moyen de la particule dans le champ extérieur. Un tel résultat rappelle le fait que, classiquement, le champ rayonné par une particule chargée est proportionnel à son accélération. Comme le nouveau champ transverse est essentiellement le rayonnement, il est naturel que ce soit l'accélération de la particule qui soit couplée à ce champ.

Le terme suivant dans le développement en puissances de \mathbf{Z} du second terme de (34.b) s'écrit

$$\frac{1}{2} q_\alpha \frac{q_\alpha^2}{m_\alpha^2} \sum_{i,j=x,y,z} Z_i(\mathbf{0}) Z_j(\mathbf{0}) (\nabla_i \nabla_j U_e(\mathbf{r}_\alpha)) \quad (39)$$

C'est un terme à deux photons car il est quadratique en \mathbf{Z} . Il est d'ordre 3 en q_α .

Le nouveau point de vue est particulièrement commode pour étudier l'effet des fluctuations du vide sur les niveaux d'énergie atomiques. Étudions la valeur moyenne dans le vide de photons des hamiltoniens d'interaction (38) et (39). Celle de (38) est nulle. Par contre, la moyenne de $Z_i Z_j$ est non nulle pour $i = j$ et représente l'écart quadratique moyen du mouvement de vibration de la particule sous l'action des fluctuations du vide. La correction au potentiel $U_e(\mathbf{r}_\alpha)$ résultant de la moyenne dans le vide de (39) représente donc l'effet du « moyennage » du potentiel U_e par la particule au cours de son mouvement de vibration. Par exemple, pour l'atome d'hydrogène, U_e est un potentiel coulombien, de sorte que :

$$\sum_i \nabla_i^2 U_e(\mathbf{r}) = - \frac{q}{\varepsilon_0} \delta(\mathbf{r}) \quad (40)$$

où q est la charge du proton. L'effet de moyennage se traduit alors par un potentiel effectif :

$$\frac{q^4}{6\varepsilon_0 m^2} \langle \mathbf{Z}^2 \rangle_{\text{vide}} \delta(\mathbf{r}) \quad (41)$$

qui relèvera légèrement les énergies des états $s(l=0)$. Telle est l'origine physique (*) de la levée de dégénérescence observée expéri-

(*) T.A. Welton, Phys. Rev. 74, 1157 (1948).

mentalement entre l'état $2s_{\frac{1}{2}}$ et l'état $2p_{\frac{1}{2}}$ (déplacement de Lamb) et discutée dans le paragraphe E-1-b du chapitre. En fait, il faut également tenir compte de l'effet du couplage (38) avec le champ transverse au deuxième ordre : il en résulte une correction de (41), qui concerne essentiellement la contribution des modes dont les fréquences sont les plus basses (voir exercice 7). Il faut également remarquer que nous n'avons évalué ainsi que la contribution des modes pour lesquels l'approximation des grandes longueurs d'onde est justifiée.

Remarques

(i) Examinons enfin les deux derniers termes de (34.b). $\varepsilon_{Coul}^{\alpha}$ est l'énergie du champ de Coulomb de la particule. D'après le raisonnement qui permet de passer de (24) à (25), $A(0)$ est, au premier ordre en q_{α} et au signe près, la vitesse de $Z(0)$. Le dernier terme de (34.b) peut donc s'écrire :

$$\frac{1}{2} m_{\alpha} \left[\frac{q_{\alpha} \dot{Z}(0)}{m_{\alpha}} \right]^2 = \frac{1}{2} m_{\alpha} \xi_{\alpha}^2 \quad (42)$$

Il représente donc l'énergie cinétique du mouvement de vibration de la particule dans le champ transverse. Enfin, le dernier terme de (34.a) est l'énergie du champ transverse dans le nouveau point de vue, c'est-à-dire l'énergie du champ transverse non lié à la particule.

(ii) La disparition des termes linéaires en q_{α} dans le nouvel hamiltonien d'interaction est une propriété intéressante qui peut être utilisée pour caractériser des transformations unitaires plus générales que la transformation de Pauli-Fierz. Supposons par exemple que l'on effectue sur l'hamiltonien en jauge de Coulomb d'un système de deux particules couplées au champ transverse une transformation unitaire qui élimine les termes d'interaction linéaires en q_{α} et q_{β} . Les effets en $q_{\alpha}q_{\beta}$, qui étaient décrits dans le point de vue de Coulomb par un échange de photons transverses entre les deux particules (interaction courant-courant étudiée dans le paragraphe F du chapitre II), doivent alors apparaître explicitement dans le nouvel hamiltonien des particules. En effet, dans le nouveau point de vue, tout échange de photons conduirait à des effets d'ordre supérieur à $q_{\alpha}q_{\beta}$. La même démarche peut être suivie pour établir des hamiltoniens d'interaction magnétique entre deux particules possédant des spins (voir par exemple l'exercice 11).

c) AVANTAGES DU NOUVEAU POINT DE VUE

Finalement, si on se limite à l'ordre le plus bas en q_{α} et à l'effet des modes de grande longueur d'onde, le point de vue de Pauli-Fierz présente de nombreux avantages.

Tout d'abord, les corrections radiatives se traduisent par des modifications simples des termes d'énergies cinétique et potentielle de la particule, dont le sens physique est très clair.

Ensuite, l'interaction entre la particule et le nouveau champ trans-

verse, qui est associé aux photons « réels », est beaucoup plus physique dans la mesure où elle fait intervenir directement l'accélération de la particule. L'étude de l'émission de rayonnement de basse fréquence au cours d'une collision s'en trouve considérablement simplifiée (voir exercices 8 et 9).

Enfin, les états asymptotiques d'un processus de collision ont une forme beaucoup plus simple dans le nouveau point de vue. En effet, en dehors de la zone d'action du potentiel U_e , l'hamiltonien (34) (ou (34')) se réduit à la somme d'un hamiltonien de particule libre et d'un hamiltonien de rayonnement. Les états asymptotiques de diffusion se présentent alors comme des simples produits d'une onde plane de particule par un état de rayonnement. Par contre, dans le point de vue de Coulomb, l'interaction entre la particule et le champ transverse subsiste dans l'état initial et dans l'état final, puisque cette interaction fait intervenir la vitesse de la particule qui, à la différence de l'accélération, ne s'annule pas avant la collision et après la collision. La particule incidente ou diffusée est donc, dans le point de vue de Coulomb, « habillée » d'un nuage de photons « virtuels », et la construction d'états asymptotiques corrects est alors plus complexe (voir complément *B*_{III}, § 2).

Tous les avantages précédents ne doivent pas cependant faire oublier les limitations du point de vue de Pauli-Fierz. Il y a tout d'abord l'approximation des grandes longueurs d'onde. On pourrait s'en affranchir, au prix de calculs plus complexes utilisant des transformations unitaires qui éliminent les termes d'interaction linéaires en q_α (voir remarque (ii) du paragraphe 3-b), ou qui consistent à remplacer dans (20) $Z(0)$ par $Z(r_\alpha)$ (*). Il y a aussi des limitations plus fondamentales que nous abordons maintenant.

d) CRITIQUE DE LA NOTION DE CHAMP LIÉ À UNE PARTICULE

L'idée de séparer le champ lié à l'électron du champ libre représente une première version de l'idée de « renormalisation » envisagée par H.A. Kramers dès 1938 (**). Ce dernier a essayé de construire une théorie classique, puis quantique, dans laquelle le champ lié à l'électron et le reste du champ électromagnétique sont constamment distingués. La contribution du champ électromagnétique à la masse de la particule proviendrait alors uniquement du champ lié. C'est effectivement ce qui se passe à l'ordre le plus bas : la correction à l'énergie cinétique apparaissant dans le premier terme de (34.b) provient du champ transverse lié à la particule et peut être interprétée comme étant associée à une correction de masse.

(*) Voir par exemple E.A. Power and T. Thirunamachandran, Am. J. Phys. **46**, 370 (1978).

(**) H.A. Kramers, Nuovo Cimento **15**, 108 (1938).

En fait, on ne peut pas avancer très loin dans cette direction. La notion même de champ lié à une particule doit être critiquée. Elle n'a de sens que pour une particule classique en mouvement uniforme. Dès que la particule accélère ou ralentit, les champs A_p et E_p , fonctions de r_α et p_α , changent instantanément dans tout l'espace. De tels champs ne peuvent donc être considérés, dans une théorie relativiste, comme des champs physiques. Dans le cadre quantique, une autre difficulté apparaît : on ne peut pas imposer à la particule un mouvement rectiligne uniforme. On peut seulement résoudre les équations de Heisenberg couplées des observables du champ et des observables de la particule, pour une particule initialement en mouvement de translation uniforme en présence du vide. Au premier ordre en q_α , on retrouve bien l'idée classique, puisque le champ calculé résulte du mouvement non perturbé de la particule. Mais, aux ordres supérieurs, le mouvement de la particule est perturbé par le champ initial qui, quantiquement, n'est jamais identiquement nul, et son mouvement n'est plus uniforme. Trouver une transformation unitaire qui réalise exactement la séparation du champ lié est en fait impossible.

Pour devenir réellement efficace, l'idée de « renormalisation » devra s'inscrire dans une perspective théorique complètement différente. D'une part, les particules doivent être décrites de façon relativiste, et les calculs menés de façon à faire apparaître constamment des grandeurs covariantes. D'autre part, l'idée même de décomposer le champ électromagnétique en deux parties est abandonnée. C'est dans le calcul de l'amplitude de probabilité d'un processus que l'on distingue des contributions différentes. Partant d'une particule dans le vide et branchant le couplage avec le champ, on identifie, sur une amplitude de probabilité, l'ensemble des processus d'interaction qui se produisent alors, comme étant ceux qui décrivent « l'habillage » de la particule par des photons virtuels, et qui résultent de l'interaction de la particule avec le champ qu'elle produit et les fluctuations du vide. La variation de l'énergie du système produite par ce couplage peut s'interpréter comme un changement de la masse de la particule. En présence d'autres particules ou d'un champ extérieur, on distingue alors dans l'amplitude de probabilité, d'une part les processus qui sont identiques aux précédents et qui s'exprimeront par une renormalisation de la masse, d'autre part les processus qui correspondent à une interaction avec une autre particule ou avec le champ extérieur.

C'est donc finalement, comme nous l'avons fait dans le chapitre, sur les amplitudes de probabilité des processus qu'il faut effectuer la séparation entre contributions à la masse électromagnétique, et contributions à la production réelle de rayonnement, et non pas sur le champ lui-même.

CHAPITRE III

Etude non perturbative des amplitudes de transition

Dans le chapitre I, nous avons introduit la notion d'amplitude de transition qui est à la base de la description quantique des processus d'interaction entre particules chargées et photons. Nous nous sommes cependant limités à une étude *perturbative* de ces amplitudes, basée sur une décomposition de l'hamiltonien total H du système en une partie non perturbée H_0 et un couplage V . Ainsi, le calcul des amplitudes de transition, présenté dans le complément A_I , a été limité à l'ordre 2 en V .

C'est également en termes perturbatifs que nous avons analysé, dans le chapitre II, un certain nombre d'effets physiques qui peuvent être observés sur des atomes interagissant avec des photons, chaque processus étant représenté diagrammatiquement à l'ordre le plus bas en V où il se manifeste. Il est cependant apparu à plusieurs reprises, au cours de ce chapitre II, qu'une compréhension plus approfondie de certains phénomènes physiques nécessite d'aller au delà de la théorie des perturbations et de tenir compte de certains effets de V à tous les ordres. C'est le cas par exemple de la désintégration radiative d'un état atomique excité, due à l'émission spontanée d'un photon, ou encore celui de la diffusion résonnante. Pour analyser ces phénomènes, nous avons utilisé dans le chapitre II des arguments qualitatifs basés sur un modèle très simplifié d'état discret couplé à un continuum parfaitement plat, décrit dans le complément C_I . Le but du présent chapitre est de reprendre ces problèmes de manière plus générale et de présenter des méthodes de calcul de l'opérateur d'évolution plus puissantes que celles du complément A_I , dans la mesure où elles conduisent à des expressions *non perturbatives* pour les amplitudes de transition.

Nous commençons dans la partie A par montrer tout l'intérêt qu'il y a à introduire, pour l'étude de ce genre de problème, la *résolvante* $G(z) = 1/(z - H)$ de l'hamiltonien H , z étant une variable complexe.

La relation qui existe entre la résolvante $G(z)$ et la résolvante « non perturbée » $G_0(z) = 1/(z - H_0)$, relative à l'hamiltonien non perturbé H_0 , est en effet une équation *algébrique*, beaucoup plus simple à manier que l'équation *intégrale* reliant les opérateurs d'évolution $U(\tau)$ et $U_0(\tau)$ associés respectivement à H et H_0 . Une fois que les éléments de matrice de $G(z)$ ont été calculés, les éléments de matrice correspondants de $U(\tau)$ s'en déduisent par une intégrale de contour. Les propriétés analytiques de $G(z)$, qui interviennent dans cette intégrale de contour, sont analysées dans le complément A_{III} .

Nous montrons ensuite dans la partie B comment l'équation algébrique reliant $G(z)$ et $G_0(z)$ peut être utilisée pour obtenir des expressions compactes et exactes *resommant* formellement la série des perturbations et privilégiant de manière explicite certains états non perturbés qui jouent un rôle important dans le processus physique étudié. Deux approches différentes sont utilisées pour introduire ces méthodes de resummation. L'une, très simple, repose sur une *représentation diagrammatique* de la série des perturbations ; l'autre, plus rigoureuse, fait appel à des *opérateurs de projection*. L'intérêt essentiel des expressions exactes ainsi obtenues est qu'elles se prêtent particulièrement bien à des approximations. On peut ainsi tenir compte à tous les ordres en V des transitions intermédiaires faisant intervenir certains états non perturbés, tout en traitant perturbativement l'effet des transitions intermédiaires vers les autres états propres de H_0 .

Ces méthodes de *resummation partielle* de la série des perturbations sont enfin appliquées dans la partie C à un certain nombre de problèmes d'électrodynamique quantique. Nous présentons ainsi un traitement non perturbatif de divers phénomènes associés à l'émission spontanée (décroissance exponentielle et déplacement radiatif d'un niveau atomique excité, distribution spectrale du rayonnement émis, cascades radiatives, effet d'un couplage entre deux niveaux de durées de vie différentes). Nous analysons également le problème des résonances à plusieurs photons et introduisons la notion de fréquence de Rabi généralisée.

Mentionnons pour finir deux autres applications qui sont étudiées dans des compléments. Le complément B_{III} montre comment il est possible d'utiliser la résolvante $G(z)$ pour étudier la diffusion résonante et pour établir une expression exacte de l'amplitude de diffusion d'un photon par un atome. Enfin, le complément C_{III} étudie, sur un modèle simple, les corrections à la décroissance exponentielle pour un état discret couplé à un continuum de largeur finie. On montre notamment par des constructions graphiques simples comment l'augmentation du couplage entre l'état discret et le continuum fait passer continûment d'un régime de décroissance exponentielle à un régime d'oscillation de Rabi.

A - OPÉRATEUR D'ÉVOLUTION ET RÉSOLVANTE

1. Equation intégrale satisfaite par l'opérateur d'évolution

Comme nous l'avons déjà indiqué dans le paragraphe 2-a du complément A_I , l'opérateur d'évolution $U(t,t')$ associé à l'hamiltonien $H = H_0 + V$ est la solution de l'équation différentielle

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t,t') = (H_0 + V) U(t,t') \quad (\text{A.1.a})$$

obéissant à la condition initiale

$$U(t',t') = 1 \quad (\text{A.1.b})$$

Il est facile de vérifier que la solution des équations (A.1) peut s'écrire

$$U(t,t') = U_0(t,t') + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 U_0(t,t_1) V U(t_1,t') \quad (\text{A.2})$$

où

$$U_0(t,t') = \exp[-iH_0(t-t')/\hbar] \quad (\text{A.3})$$

est l'opérateur d'évolution associé à l'hamiltonien non perturbé H_0 . L'équation intégrale (A.2) satisfaite par l'opérateur d'évolution peut être itérée pour donner le développement perturbatif de $U(t,t')$ en puissances de V . On obtient ainsi l'équation (13) du complément A_I et le développement des amplitudes de transition donné par l'équation (C.8) du chapitre I.

La contrainte imposée à t_1 de varier entre t' et t empêche que l'intégrale figurant en (A.2) soit un produit de convolution. C'est pour éliminer cette contrainte et faire apparaître un vrai produit de convolution, se transformant en produit simple par transformation de Fourier, que nous introduisons maintenant de nouveaux opérateurs, très étroitement reliés à $U(t,t')$.

2. Fonctions de Green - Propagateurs

Considérons les opérateurs K_+ et K_{0+} définis par

$$K_+(t,t') = U(t,t') \theta(t-t') \quad (\text{A.4})$$

$$K_{0+}(t,t') = U_0(t,t') \theta(t-t') \quad (\text{A.5})$$

où $\theta(x)$ est la fonction de Heaviside, égale à 1 pour $x > 0$, et à 0 pour $x < 0$. En multipliant les deux membres de (A.2) par $\theta(t-t')$, et en remplaçant $\int_{t'}^t dt_1$ par $\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \theta(t-t_1) \theta(t_1-t')$, on

vérifie aisément que

$$K_+(t,t') = K_{0+}(t,t') + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 K_{0+}(t,t_1) V K_+(t_1,t') \quad (\text{A.6})$$

L'équation (A.6), très analogue à (A.2), fait intervenir maintenant un vrai produit de convolution.

Avant de prendre la transformée de Fourier de (A.6), notons que, compte tenu de (A.1.a) et du fait que $d\theta(x)/dx = \delta(x)$, $K_+(t,t')$ obéit à l'équation

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt} - H \right) K_+(t,t') = i\hbar \delta(t-t') \quad (\text{A.7})$$

La forme de l'équation (A.7), avec une fonction $\delta(t-t')$ au second membre, explique pourquoi l'opérateur $K_+(t,t')$ est appelé parfois « *fonction de Green* ». En fait, il s'agit d'une fonction de Green retardée puisque $K_+(t,t')$ n'est non nul que pour $t > t'$. Il est possible également d'introduire des fonctions de Green avancées

$$K_-(t,t') = -U(t,t') \theta(t'-t) \quad (\text{A.8})$$

$$K_{0-}(t,t') = -U_0(t,t') \theta(t'-t) \quad (\text{A.9})$$

K_- obéit à la même équation d'évolution que K_+

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt} - H \right) K_-(t,t') = i\hbar \delta(t-t') \quad (\text{A.10})$$

mais satisfait à des conditions aux limites différentes.

Introduisons maintenant la transformée de Fourier de $K_+(t,t')$, qui ne dépend en fait que de $\tau = t - t'$. Posons pour cela

$$K_+(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE\tau/\hbar} G_+(E) \quad (\text{A.11})$$

le coefficient $-1/2\pi i$ étant introduit pour avoir la forme la plus simple possible pour G_+ . En inversant (A.11), nous obtenons

$$G_+(E) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{iE\tau/\hbar} K_+(\tau) \quad (\text{A.12})$$

Comme $K_+(\tau) = e^{-iH\tau/\hbar} \theta(\tau)$, l'équation (A.12) devient

$$\begin{aligned} G_+(E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{i(E-H)\tau/\hbar} \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{i(E-H+i\eta)\tau/\hbar} \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{E - H + i\eta} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

où η est un nombre réel que l'on fait tendre vers zéro par valeurs positives. Des calculs analogues peuvent être faits pour K_- et sa transformée de Fourier $G_-(E)$ définie par

$$K_-(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE\tau/\hbar} G_-(E) \quad (\text{A.14})$$

Ils conduisent à :

$$G_-(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{E - H - i\eta} \quad (\text{A.15})$$

Les opérateurs $G_+(E)$ et $G_-(E)$, introduits en (A.13) et (A.15) sont appelés *propagateurs* retardé et avancé.

Par transformation de Fourier, l'intégrale de (A.6) devient un simple produit, et l'équation intégrale (A.6) devient une équation algébrique

$$G_+(E) = G_{0+}(E) + G_{0+}(E) V G_+(E) \quad (\text{A.16})$$

où $G_{0+}(E)$ est le propagateur retardé associé à H_0 . Notons d'ailleurs que l'équation (A.16) peut être établie directement à partir de l'identité

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B} (B - A) \frac{1}{A} \quad (\text{A.17})$$

écrite avec $A = E - H + i\eta$, $B = E - H_0 + i\eta$ et donc $B - A = H - H_0 = V$.

3. Résolvante de l'hamiltonien

La forme très simple de $G_\pm(E)$ suggère d'introduire l'opérateur $G(z)$, fonction de la variable complexe z , défini par

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (\text{A.18})$$

$G(z)$ est appelé *résolvante* de l'hamiltonien H . Les propagateurs $G_+(E)$ et $G_-(E)$ sont simplement les limites de $G(z)$ quand z tend vers le point E de l'axe réel, par valeurs positives ou négatives de la partie imaginaire

$$G_\pm(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} G(E \pm i\eta) \quad (\text{A.19})$$

L'opérateur d'évolution $U(\tau)$ s'exprime par une intégrale de contour simple de $G(z)$. Comme $\theta(x) + \theta(-x) = 1$, les équations (A.4) et (A.8), entraînent en effet que

$$U(\tau) = K_+(\tau) - K_-(\tau) \quad (\text{A.20})$$

ce qui donne, compte tenu de (A.11) et (A.14)

$$U(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE\tau/\hbar} [G_-(E) - G_+(E)] \quad (\text{A.21})$$

Il suffit alors d'utiliser (A.19) pour obtenir

$$U(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_+ + C_-} dz e^{-iz\tau/\hbar} G(z) \quad (\text{A.22})$$

où $C_+ + C_-$ est le contour représenté sur la figure 1. C_+ et C_- sont des droites situées respectivement immédiatement au dessus et au dessous de l'axe réel et parcourues de droite à gauche pour C_+ , de gauche à droite pour C_- . Pour $\tau > 0$ ($\tau < 0$), la contribution de C_- (C_+) est nulle.

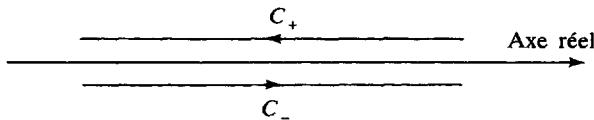


Figure 1. Contour d'intégration figurant dans l'intégrale donnant $U(\tau)$ en fonction de $G(z)$.

Comme $U(\tau)$ se déduit de $G(z)$ par une intégrale de contour, il est clair que les propriétés analytiques de la résolvante $G(z)$ jouent un rôle important dans la détermination des propriétés de $U(\tau)$. On peut montrer (voir complément A_{III}) que les éléments de matrice de $G(z)$ sont des fonctions analytiques de z dans tout le plan complexe privé de l'axe réel. Les singularités, qui sont toutes sur l'axe réel, consistent en des pôles situés aux valeurs propres discrètes de l'hamiltonien H , et en des coupures s'étendant sur les intervalles correspondant au spectre continu de H . Une coupure est caractérisée par le fait que les éléments de matrice de $G(z)$ ne tendent pas vers la même valeur, quand z tend vers un point de l'axe réel situé sur la coupure, par dessus ou par dessous. La différence entre ces deux valeurs représente l'écart entre les deux « lèvres » de la coupure. Notons d'ailleurs qu'il est possible, en partant par exemple du demi plan supérieur, de prolonger analytiquement, à travers la coupure, la détermination de $G(z)$ du demi plan supérieur vers le demi plan inférieur. On explore ainsi le « deuxième feuillet de Riemann ». La fonction prolongée n'est plus nécessairement analytique en dehors de l'axe réel et peut avoir des pôles complexes, qui se trouvent décrire des états *instables* du système (états ayant une énergie complexe et caractérisés par un amortissement exponentiel).

Nous aurons l'occasion de revenir plus loin sur ce point.

Donnons enfin le développement perturbatif de $G(z)$ en puissances de V . L'identité (A.17), appliquée à $A = z - H$, $B = z - H_0$, donne

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z) \quad (\text{A.23})$$

où $G_0(z)$ est la résolvante de H_0 . Cette équation algébrique peut être itérée aisément pour donner

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) V G_0(z) + \dots \quad (\text{A.24})$$

Prenons l'élément de matrice de (A.24) entre les états propres $\langle \varphi_k |$ et $|\varphi_l \rangle$ de H_0 , d'énergies non perturbées E_k et E_l . En utilisant la relation de fermeture sur les états propres $|\varphi_i \rangle$ de H_0 , et en posant $G_{kl}(z) = \langle \varphi_k | G(z) | \varphi_l \rangle$, $V_{ij} = \langle \varphi_i | V | \varphi_j \rangle$, on obtient

$$\begin{aligned} G_{kl}(z) &= \frac{1}{z - E_k} \delta_{kl} + \frac{1}{z - E_k} V_{kl} \frac{1}{z - E_l} + \\ &+ \sum_i \frac{1}{z - E_k} V_{ki} \frac{1}{z - E_i} V_{il} \frac{1}{z - E_l} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

La structure de (A.25) est très simple et fait intervenir des produits d'éléments de matrice de V et de dénominateurs d'énergie (non perturbée).

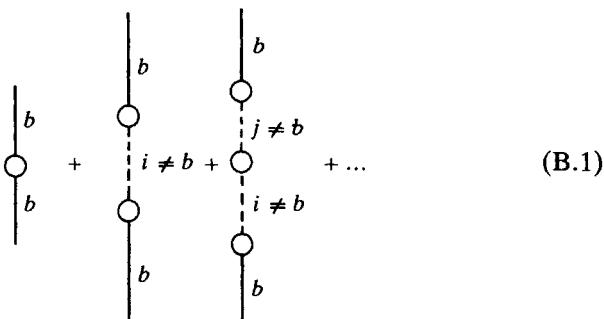
B - RESOMMATION FORMELLE DE LA SÉRIE DE PERTURBATION

1. Etude d'un exemple simple - Méthode diagrammatique

La forme simple du développement (A.24) ou (A.25) permet de regrouper les termes où un dénominateur d'énergie $1/(z - E_b)$ relatif à un état non perturbé particulier $|\varphi_b\rangle$ apparaît n fois, puis de resommer formellement la série de perturbations. On aboutit ainsi à des expressions compactes et exactes sur lesquelles des approximations intéressantes peuvent ensuite être effectuées.

Supposons par exemple que $|\varphi_b\rangle$ soit un état discret de H_0 , d'énergie E_b , bien isolé de tous les autres états discrets (par contre, E_b peut tomber à l'intérieur du spectre continu de H_0). L'élément de matrice $G_{0b}(z) = \langle\varphi_b|G_0(z)|\varphi_b\rangle = 1/(z - E_b)$ de la résolvante non perturbée a un pôle en $z = E_b$ et varie par suite très rapidement sur le contour $C_+ + C_-$ de la figure 1 au voisinage de $z = E_b$. On s'attend donc à ce qu'il en soit de même pour l'élément de matrice de la résolvante perturbée $G_b(z) = \langle\varphi_b|G(z)|\varphi_b\rangle$, qui tend vers $G_{0b}(z)$ quand V tend vers zéro. Il est clair qu'au voisinage de $z = E_b$, les dénominateurs d'énergie en $1/(z - E_b)$ du développement (A.25) de $G_b(z)$ jouent un rôle essentiel. Essayons donc de regrouper les termes de ce développement qui contiennent tous le même nombre de dénominateurs en $1/(z - E_b)$.

Avec $k = l = b$, le terme d'ordre zéro en V de (A.25) se réduit à $1/(z - E_b)$ et contient donc une fois ce dénominateur d'énergie. Comme $k = l = b$, les termes suivants du développement contiennent au moins deux fois $1/(z - E_b)$. Pour qu'ils ne contiennent que deux fois $1/(z - E_b)$, il faut que tous les autres dénominateurs d'énergie soient relatifs à des états $|\varphi_i\rangle$ autres que $|\varphi_b\rangle$. L'ensemble de ces termes peut donc se représenter diagrammatiquement sous la forme



où un trait plein représente un terme $1/(z - E_b)$, un trait pointillé un terme $1/(z - E_i)$ avec $i \neq b$, un rond un élément de matrice de

V entre les deux états associés aux traits situés de part et d'autre du rond (la sommation sur les états intermédiaires $i, j \dots$ est sous-entendue). La somme (B.1) peut être réécrite formellement



où le carré symbolise la somme

$$\square = \bigcirc + \begin{array}{c} \bigcirc \\ \vdots \\ \bigcirc \end{array} + \begin{array}{c} \bigcirc \\ \vdots \\ \bigcirc \end{array} + \dots \quad (\text{B.3})$$

et dont l'expression explicite, notée $R_b(z)$, est égale à

$$\begin{aligned} R_b(z) &= V_{bb} + \sum_{i \neq b} V_{bi} \frac{1}{z - E_i} V_{ib} + \\ &+ \sum_{i \neq b} \sum_{j \neq b} V_{bi} \frac{1}{z - E_i} V_{ij} \frac{1}{z - E_j} V_{jb} + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Le raisonnement précédent se généralise aisément aux termes qui contiennent n dénominateurs en $1/(z - E_b)$. Par exemple, l'ensemble des termes $n = 3$ est représenté par



et contribue à $G_b(z)$ par

$$\frac{1}{(z - E_b)^3} [R_b(z)]^2 \quad (\text{B.6})$$

Il suffit ensuite de sommer les contributions correspondant aux diverses

valeurs de n pour obtenir

$$G_b(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[R_b(z)]^{n-1}}{(z - E_b)^n} = \frac{1}{z - E_b} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{R_b(z)}{z - E_b} \right]^n \quad (\text{B.7})$$

c'est-à-dire encore

$$G_b(z) = \frac{1}{z - E_b - R_b(z)} \quad (\text{B.8})$$

Il convient de bien noter que l'expression (B.8), qui resomme formellement la série de perturbation en faisant jouer un rôle privilégié à l'état $|\varphi_b\rangle$, est une expression *exacte*. Nous en avons donné ici une « démonstration diagrammatique ». Nous allons maintenant présenter une autre démonstration de (B.8), qui utilise des opérateurs de projection et qui a l'avantage de pouvoir s'appliquer à des situations où il est intéressant de privilégier, non pas un seul, mais plusieurs états propres discrets de H_0 .

2. Méthode algébrique utilisant des opérateurs de projection

a) PROJECTEUR SUR UN SOUS-ESPACE \mathcal{E}_0 DE L'ESPACE DES ÉTATS

Soit \mathcal{E}_0 un sous-espace de l'espace des états sous-tendu par un ensemble de vecteurs propres de H_0 , $\{|\varphi_a\rangle, |\varphi_b\rangle, \dots, |\varphi_l\rangle\}$, qui jouent un rôle important dans le processus physique étudié et que l'on désire privilégier dans le développement de $G(z)$ en puissances de V . Si les états $|\varphi_a\rangle, |\varphi_b\rangle, \dots, |\varphi_l\rangle$ sont orthonormés, le projecteur sur le sous-espace \mathcal{E}_0 s'écrit :

$$P = |\varphi_a\rangle \langle \varphi_a| + |\varphi_b\rangle \langle \varphi_b| + \dots + |\varphi_l\rangle \langle \varphi_l| \quad (\text{B.9})$$

et satisfait aux relations

$$P = P^+ \quad (\text{B.10.a})$$

$$P^2 = P \quad (\text{B.10.b})$$

caractéristiques d'un projecteur orthogonal.

Nous désignerons par \mathcal{S}_0 le sous-espace supplémentaire de \mathcal{E}_0 et par Q le projecteur sur \mathcal{S}_0 qui s'écrit

$$Q = 1 - P \quad (\text{B.11})$$

et satisfait à des relations analogues à (B.10)

$$Q = Q^+ \quad (\text{B.12.a})$$

$$Q^2 = Q \quad (\text{B.12.b})$$

Comme les sous-espaces \mathcal{E}_0 et \mathcal{S}_0 sont orthogonaux, on a de plus

$$PQ = QP = 0 \quad (\text{B.13})$$

Par ailleurs, le fait que les états $|\varphi_a\rangle, |\varphi_b\rangle, \dots, |\varphi_l\rangle$ soient états propres de H_0 entraîne que

$$[P, H_0] = [Q, H_0] = 0 \quad (\text{B.14})$$

et par suite, d'après (B.13), que

$$P H_0 Q = Q H_0 P = 0 \quad (\text{B.15})$$

Nous nous proposons de calculer ici la restriction $P G(z) P$ de $G(z)$ dans le sous-espace \mathcal{E}_0 . Nous calculerons également les autres restrictions de $G(z)$: à l'intérieur de \mathcal{S}_0 , $Q G(z) Q$, et entre \mathcal{E}_0 et \mathcal{S}_0 , $P G(z) Q$ et $Q G(z) P$.

b) CALCUL DE LA RESTRICTION DE LA RÉSOLVANTE DANS LE SOUS-ESPACE \mathcal{E}_0

Partons de l'équation de définition de $G(z)$

$$(z - H_0 - V) G(z) = 1 \quad (\text{B.16})$$

que nous multiplions à droite par P , à gauche par P ou Q . Si l'on insère $P + Q = 1$ (voir (B.11)) entre $(z - H_0 - V)$ et $G(z)$ et qu'on utilise (B.15), on obtient les deux équations suivantes

$$P (z - H) P [P G(z) P] - P V Q [Q G(z) P] = P \quad (\text{B.17})$$

$$- Q V P [P G(z) P] + Q (z - H) Q [Q G(z) P] = 0 \quad (\text{B.18})$$

qui sont deux équations opératorielles reliant les deux opérateurs $P G(z) P$ et $Q G(z) P$. Pour éliminer $Q G(z) P$ entre ces deux équations, il suffit de réécrire (B.18) sous la forme

$$Q G(z) P = \frac{Q}{z - Q H_0 Q - Q V Q} V P G(z) P \quad (\text{B.19})$$

et de reporter ensuite (B.19) dans (B.17) pour obtenir

$$P[z - H_0 - V - V \frac{Q}{z - Q H_0 Q - Q V Q} V] P G(z) P = P \quad (\text{B.20})$$

Introduisons alors l'opérateur $R(z)$ défini par

$$R(z) = V + V \frac{Q}{z - Q H_0 Q - Q V Q} V \quad (\text{B.21})$$

L'opérateur $R(z)$ est appelé « *opérateur déplacement* » pour des raisons qui apparaîtront plus loin. Son développement perturbatif en puissances

de V s'écrit

$$R(z) = V + V \frac{Q}{z - H_0} V + V \frac{Q}{z - H_0} V \frac{Q}{z - H_0} V + \dots \quad (\text{B.22})$$

(Nous avons utilisé (B.12.b) et (B.14) pour écrire $Q[z - Q H_0 Q]^{-1} = Q [z - H_0]^{-1}$). La présence des opérateurs de projection Q dans le développement (B.22) entraîne que les dénominateurs d'énergie apparaissant dans (B.22) sont tous relatifs à des états propres de H_0 autres que ceux qui sous-tendent \mathcal{E}_0 . En reportant (B.21) dans (B.20), nous obtenons pour la restriction de $G(z)$ dans \mathcal{E}_0 l'expression

$$P G(z) P = \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} \quad (\text{B.23})$$

qui généralise l'équation (B.8).

Montrons tout d'abord que l'équation (B.23) redonne bien (B.8) quand le sous-espace \mathcal{E}_0 ne contient qu'un état propre $|\varphi_b\rangle$ de H_0 , auquel cas

$$P = |\varphi_b\rangle \langle \varphi_b| \quad (\text{B.24})$$

$$Q = \mathbb{1} - |\varphi_b\rangle \langle \varphi_b| = \sum_{i \neq b} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (\text{B.25})$$

Les restrictions dans \mathcal{E}_0 de $G(z)$, $R(z)$, H_0 , qui apparaissent dans (B.23), se réduisent alors à des matrices 1×1 , c'est-à-dire à des nombres égaux respectivement à $G_b(z) = \langle \varphi_b | G(z) | \varphi_b \rangle$, $R_b(z) = \langle \varphi_b | R(z) | \varphi_b \rangle$ et $\langle \varphi_b | H_0 | \varphi_b \rangle = E_b$. L'équation (B.23) a donc bien la même forme que (B.8). De plus, en prenant l'élément de matrice des deux membres de (B.22) entre $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ et en utilisant la forme (B.25) de Q , nous vérifions que la quantité $R_b(z)$ apparaissant dans (B.23) coïncide bien avec le développement (B.4) trouvé plus haut de manière diagrammatique.

Dans la partie C, nous envisagerons également des situations où le sous-espace \mathcal{E}_0 contient deux états propres discrets $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ de H_0 , de valeurs propres E_b et E_c , auquel cas

$$P = |\varphi_b\rangle \langle \varphi_b| + |\varphi_c\rangle \langle \varphi_c| \quad (\text{B.26})$$

$$Q = \sum_{i \neq b,c} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (\text{B.27})$$

La matrice représentant $P G(z) P$ dans la base $\{|\varphi_b\rangle, |\varphi_c\rangle\}$ de \mathcal{E}_0 est alors une matrice 2×2

$$\begin{pmatrix} G_{bb}(z) & G_{bc}(z) \\ G_{cb}(z) & G_{cc}(z) \end{pmatrix} \quad (\text{B.28})$$

L'équation (B.23) exprime que la matrice 2×2 écrite en (B.28) est l'inverse de la matrice.

$$\begin{pmatrix} z - E_b - R_{bb}(z) & -R_{bc}(z) \\ -R_{cb}(z) & z - E_c - R_{cc}(z) \end{pmatrix} \quad (\text{B.29})$$

c) CALCUL DES AUTRES RESTRICTIONS DE $G(z)$

Le report de (B.23) dans (B.19) donne

$$Q G(z) P = \frac{Q}{z - Q H_0 Q - Q V Q} V \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} \quad (\text{B.30})$$

Pour obtenir $P G(z) Q$, il suffit de prendre les adjoints des deux membres de (B.30) et d'utiliser l'hermiticité de P, Q, H_0, V . En changeant z^* en z dans l'équation ainsi obtenue, nous trouvons

$$P G(z) Q = \frac{P}{z - P H_0 P - P R(z) P} V \frac{Q}{z - Q H_0 Q - Q V Q} \quad (\text{B.31})$$

Calculons enfin $Q G(z) Q$. Multiplions pour cela (B.16) à droite et à gauche par Q . Il vient

$$Q(z - H) Q [Q G(z) Q] - Q V P [P G(z) Q] = Q \quad (\text{B.32})$$

On en déduit, compte tenu de (B.31)

$$\begin{aligned} QG(z)Q &= \frac{Q}{z - QH_0Q - QVQ} + \\ &+ \frac{Q}{z - QH_0Q - QVQ} V \frac{P}{z - PH_0P - PR(z)P} V \frac{Q}{z - QH_0Q - QVQ} \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

d) INTERPRÉTATION DE L'OPÉRATEUR DÉPLACEMENT

L'opérateur $P R(z) P$ apparaît au dénominateur des expressions (B.23), (B.30), (B.31) et (B.33) donnant les diverses restrictions de $G(z)$. « Oublions » momentanément que $P R(z) P$ dépend de z . L'examen de (B.23) suggère alors de considérer $P R P$ comme un « hamiltonien » dans le sous-espace \mathcal{E}_0 , s'ajoutant à $P H_0 P$ et permettant de déterminer les déplacements des niveaux perturbés par rapport aux niveaux non perturbés, d'où le nom d'opérateur déplacement donné à $R(z)$. Cette interprétation de $P R P$ permet également de comprendre simplement la structure des autres expressions obtenues plus haut. Par exemple, la lecture de l'expression (B.30) (de la droite vers la gauche) suggère que le système, partant de \mathcal{E}_0 , évolue sous

l'effet de « l'hamiltonien » $P H_0 P + P R P$, passe sous l'effet du couplage V dans le sous-espace \mathcal{E}_0 où il évolue sous l'effet de l'hamiltonien $Q H_0 Q + Q V Q$.

Essayons maintenant de préciser un peu plus la dépendance en z de $P R(z) P$. En fait, dans l'intégrale de contour (A.22) qui permet de calculer les éléments de matrice de $U(\tau)$ à partir de ceux de $G(z)$, ce sont les valeurs de $G(z)$ au voisinage immédiat de l'axe réel qui interviennent. Il est donc important de calculer les éléments de matrice de $P R(z) P$ pour $z = E \pm i\eta$, où E est un point de l'axe réel et η un infiniment petit positif. Soient $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ deux états propres de H_0 appartenant à \mathcal{E}_0 . D'après (B.21), nous avons

$$R_{bc}(E \pm i\eta) = V_{bc} + \langle \varphi_b | V Q \frac{1}{E - Q H Q \pm i\eta} Q V | \varphi_c \rangle \quad (\text{B.34})$$

Comme

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \frac{x}{x^2 + \eta^2} \mp \frac{i\eta}{x^2 + \eta^2} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi \delta(x) \quad (\text{B.35})$$

il vient

$$R_{bc}(E \pm i\eta) = V_{bc} + \hbar \left(\Delta_{bc}(E) \mp i \frac{\Gamma_{bc}(E)}{2} \right) \quad (\text{B.36})$$

où

$$\Delta_{bc}(E) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \langle \varphi_b | V \frac{Q}{E - Q H Q} V | \varphi_c \rangle \quad (\text{B.37})$$

$$\Gamma_{bc}(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \langle \varphi_b | V Q \delta(E - Q H Q) Q V | \varphi_c \rangle \quad (\text{B.38})$$

Comme les opérateurs V, H, P, Q sont hermitiques, il est clair sur (B.37) et (B.38) que les matrices d'éléments $\Delta_{bc}(E)$ et $\Gamma_{bc}(E)$ sont hermitiques

$$\begin{aligned} \Delta_{bc}(E) &= \Delta_{cb}^*(E) \\ \Gamma_{bc}(E) &= \Gamma_{cb}^*(E) \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Par contre, la présence du facteur i dans (B.36) montre que, si $\Gamma_{bc}(E)$ est non nul, l'opérateur $P R(E \pm i\eta) P$ est représenté dans \mathcal{E}_0 par une matrice *non hermitique*. Même s'il est légitime, comme nous le verrons par la suite dans de nombreux cas, de négliger la variation avec E de $\Delta_{bc}(E)$ et $\Gamma_{bc}(E)$ autour de l'énergie non perturbée des niveaux de \mathcal{E}_0 , $P R(E \pm i\eta) P$ n'est pas un vrai hamiltonien. La partie antihermitique de cet opérateur (provenant des termes $\mp i\hbar \Gamma_{bc}$) décrit des phénomènes *dissipatifs*, c'est-à-dire exprime le fait que le système peut quitter \mathcal{E}_0 de manière irréversible.

Remarque

Lorsque $\Gamma_{bc}(E)$ est non nul, il apparaît également sur (B.36) que $R_{bc}(E \pm i\eta)$ ne tend pas vers la même valeur quand z tend vers le point E de l'axe réel par dessus ou par dessous, ce qui est caractéristique d'une coupure. En fait, on peut montrer par des calculs analogues à ceux du complément A_{III} que $P R(z) P$ admet des coupures sur tous les intervalles de l'axe réel correspondant au spectre continu de QHQ . Par contre, $P R(z) P$ diverge quand z tend une valeur propre discrète E_α de QHQ , auquel cas $\Delta_{bc}(E)$ et $\Gamma_{bc}(E)$ ne sont pas définis en $E = E_\alpha$.

3. Introduction de quelques approximations

Toutes les expressions établies dans le paragraphe précédent sont exactes. Nous allons montrer maintenant qu'elles se prêtent particulièrement bien à des approximations de type non perturbatif prenant en compte certaines contributions de V à tous les ordres et privilégiant un ou plusieurs états non perturbés.

a) CALCUL PERTURBATIF DE L'OPÉRATEUR DÉPLACEMENT. RESOMMATION PARTIELLE DE LA SÉRIE DE PERTURBATION.

Considérons tout d'abord la situation envisagée au paragraphe B-1 ci-dessus où H_0 possède un état propre discret $|\varphi_b\rangle$ bien éloigné de tous les autres états propres discrets de H_0 . Comme nous l'avons déjà indiqué, c'est au voisinage de $z = E_b$ sur le contour $C_+ + C_-$ de la figure 1 que $G_b(z)$ prend les valeurs les plus importantes. Etudions alors l'expression (B.4) au voisinage de $z = E_b$. Tous les dénominateurs d'énergie intervenant dans le développement de $R_b(z)$ sont grands puisque les autres énergies discrètes de H_0 sont, par hypothèse, éloignées de E_b . Par ailleurs, même si E_b tombe dans le spectre continu de H_0 , les sommes sur les états intermédiaires associés à ce spectre continu font intervenir des fonctions delta et des parties principales qui ne conduisent à aucune divergence (voir les calculs du paragraphe C-1-a ci-dessous). Si V est suffisamment petit devant H_0 , la série (B.4) est rapidement convergente et il semble tout à fait légitime d'approximer $R_b(z)$ en ne gardant qu'un nombre fini de termes dans le développement (B.4), ou (B.3). Par exemple, on peut ne garder que les deux premiers termes de ces développements, ce qui revient à remplacer (B.4) par

$$\hat{R}_b(z) = V_{bb} + \sum_{i \neq b} V_{bi} \frac{1}{z - E_i} V_{ib} \quad (\text{B.40})$$

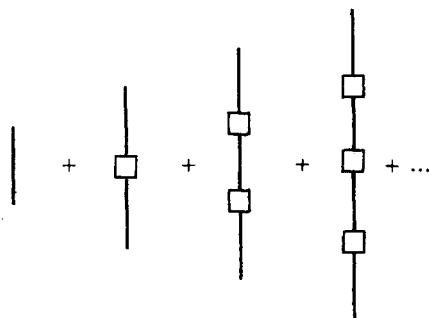
ou encore (B.3) par

$$\Delta = \textcircled{O} + \begin{array}{c} \textcircled{O} \\ \cdots \\ \textcircled{O} \end{array} \quad (\text{B.41})$$

L'intérêt essentiel de l'expression (B.8) est qu'une approximation perturbative sur $R_b(z)$ ne correspond pas à une approximation perturbative sur $G_b(z)$. En effet, le remplacement dans (B.8) de $R_b(z)$ par l'expression approchée (B.40) revient à approximer $G_b(z)$ par

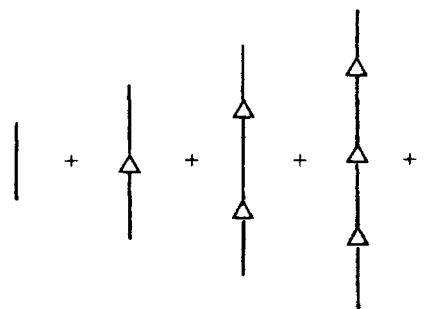
$$G_b(z) \approx \frac{1}{z - E_b - \hat{R}_b(z)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\hat{R}_b(z)]^n}{(z - E_b)^{n+1}} \quad (\text{B.42})$$

Il est clair sur (B.42) que l'expression approchée de $G_b(z)$, obtenue après l'approximation (B.40), contient des puissances arbitrairement élevées de V et ne correspond donc pas à une troncature du développement (A.24). En d'autres termes, l'approximation (B.40) revient à faire une *resommation partielle* de la série de perturbation : la somme infinie



$$\begin{array}{ccccccc} | & + & \square & | & + & \square & | \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & \square & & & \square & \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & \square & & & \square & \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & & & & & \dots \end{array} \quad (\text{B.43})$$

est remplacé par une autre somme infinie



$$\begin{array}{ccccccc} | & + & \triangle & | & + & \triangle & | \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & \triangle & & & \triangle & \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & \triangle & & & \triangle & \\ & & \downarrow & & & \downarrow & \\ & & & & & & \dots \end{array} \quad (\text{B.44})$$

où l'on garde *tous* les dénominateurs en $1/(z - E_b)$ mais où l'on ne conserve au plus qu'un seul dénominateur en $1/(z - E_i)$ avec $i \neq b$ entre deux dénominateurs en $1/(z - E_b)$.

Les considérations précédentes se généralisent aisément au cas où H_0 possède plusieurs états propres discrets formant un ensemble bien isolé des autres états propres discrets de H_0 . Si P est le projecteur sur le sous-espace \mathcal{E}_0 correspondant, l'approximation équivalente à (B.40)

consiste à ne garder que les deux premiers termes du développement (B.22) et à remplacer donc, dans (B.23), $P R(z) P$ par

$$P \hat{R}(z) P = P V P + P V \frac{Q}{z - H_0} V P \quad (\text{B.45})$$

b) APPROXIMATION CONSISTANT À NÉGLIGER LA DÉPENDANCE EN ÉNERGIE DE L'OPÉRATEUR DÉPLACEMENT

Comme dans le paragraphe précédent, supposons tout d'abord que le sous-espace \mathcal{E}_0 ne contienne qu'un seul état $|\varphi_b\rangle$ et considérons l'expression (B.8) écrite pour $z = E \pm i\eta$

$$G_b(E \pm i\eta) = \frac{1}{E \pm i\eta - E_b - R_b(E \pm i\eta)} \quad (\text{B.46})$$

Il arrive très fréquemment que les variations avec E de $R_b(E \pm i\eta)$ soient beaucoup plus lentes que celles de $G_b(E \pm i\eta)$, en particulier au voisinage de $E = E_b$, où le « souvenir » du pôle apparaissant sur la résolvante non perturbée $G_{0b}(z) = 1/(z - E_b)$ se manifeste par un comportement résonnant de $G_b(E \pm i\eta)$. Une approximation couramment effectuée consiste alors à négliger la variation avec E de $R_b(E \pm i\eta)$ et à poser dans (B.46)

$$R_b(E \pm i\eta) \approx R_b(E_b \pm i\eta) \quad (\text{B.47})$$

Nous reviendrons plus loin (§ C-1-c) sur les conditions de validité d'une telle approximation. Comme $R_b(E_b \pm i\eta)$ est une quantité complexe indépendante de E , il apparaît sur (B.46) qu'une telle approximation revient à corriger l'énergie non perturbée E_b d'une quantité complexe, la partie réelle de la correction représentant un déplacement d'énergie et la partie imaginaire un élargissement.

Dans le cas général, \mathcal{E}_0 a une dimension supérieure à 1. Supposons que les états $|\varphi_a\rangle, |\varphi_b\rangle \dots |\varphi_l\rangle$ qui sous-tendent \mathcal{E}_0 aient des énergies E_a, E_b, \dots, E_l groupées autour de E_0 . L'approximation équivalente à (B.47) consiste alors à poser

$$P R(E \pm i\eta) P \approx P R(E_0 \pm i\eta) P \quad (\text{B.48})$$

Remarques

- (i) Il est bien sûr possible d'effectuer à la fois les deux approximations précédentes, c'est-à-dire de remplacer $R_b(z)$ par une expression perturbative $\hat{R}_b(z)$, puis de négliger les variations avec E de $\hat{R}_b(E \pm i\eta)$.
- (ii) En remplaçant $R_b(E \pm i\eta)$ par $R_b(E_b \pm i\eta)$ dans (B.46), on obtient une expression approchée de $G_b(E \pm i\eta)$ qui ne peut plus présenter de pôles au voisinage des autres valeurs propres discrètes de H_0 . Or,

l'expression exacte de $G_b(z)$, $G_b(z) = \langle \varphi_b | (z - H)^{-1} | \varphi_b \rangle$, montre que $G_b(z)$ possède des pôles aux valeurs propres discrètes E_α de H , les résidus correspondant à ces pôles étant égaux à $|\langle \varphi_b | \psi_\alpha \rangle|^2$, où $|\psi_\alpha\rangle$ est l'état propre de H de valeur propre E_α . Le résidu $|\langle \varphi_b | \psi_\alpha \rangle|^2$ est très petit si V est très petit et si $|\psi_\alpha\rangle$ tend, quand V tend vers zéro, vers un état propre discret de H_0 orthogonal à $|\varphi_b\rangle$. Ce sont ces pôles, de résidu très petit, que l'approximation (B.47) fait disparaître de $G_b(z)$.

C - ÉTUDE DE QUELQUES EXEMPLES D'APPLICATION

Nous appliquons maintenant les méthodes non perturbatives précédentes à l'étude de quelques problèmes d'électrodynamique quantique. Un exemple important de situation où le sous-espace \mathcal{E}_0 ne contient qu'un seul état discret est celui de l'émission spontanée de rayonnement à partir d'un état atomique excité discret. Nous montrons dans le paragraphe 1 comment l'étude de la restriction $P G(z) P$ de $G(z)$ dans \mathcal{E}_0 permet d'étudier l'évolution de l'état excité et de retrouver la décroissance exponentielle de cet état ainsi que son déplacement radiatif. Toujours sur cet exemple simple, nous montrons ensuite dans le paragraphe 2 comment l'étude de $Q G(z) P$ permet de calculer la répartition spectrale des photons émis spontanément et d'analyser d'autres phénomènes physiques intéressants comme les cascades radiatives. Les deux derniers paragraphes sont consacrés à l'étude de situations physiques où deux états discrets $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ jouent un rôle important (sous-espace \mathcal{E}_0 de dimension 2). Nous commençons (§ 3) par étudier l'effet d'un couplage entre deux niveaux atomiques excités de durées de vie différentes, un exemple important d'une telle situation étant la disparition de la métastabilité de l'état $2\ s$ de l'Hydrogène par couplage Stark avec l'état $2\ p$. Nous étudions enfin (§ 4) les déplacements lumineux et la fréquence de Rabi généralisée associés à une résonance à plusieurs photons entre deux niveaux atomiques discrets (*).

1. Evolution d'un état atomique excité

a) CALCUL NON PERTURBATIF DE L'AMPLITUDE DE PROBABILITÉ POUR QUE L'ATOME RESTE EXCITÉ

Considérons un atome dans un état excité discret $|b\rangle$ non dégénéré. Pour simplifier, nous ignorons les degrés de liberté externes de translation. Soit

$$|\varphi_b\rangle = |b;0\rangle \quad (\text{C.1})$$

l'état du système global atome + rayonnement représentant l'atome dans l'état excité b dans le vide de photons. L'état $|\varphi_b\rangle$ est un état propre de l'hamiltonien non perturbé H_0 , dont l'énergie E_b est supposée

(*) Les exemples physiques considérés dans les paragraphes 3 et 4 correspondent à la situation générale où les deux niveaux $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ ont des largeurs différentes. Le cas où les deux niveaux $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ sont, soit stables, soit de même largeur, se rencontre dans les expériences de résonance magnétique dans les niveaux fondamentaux ou excités. Cette situation conduit à des calculs plus simples (voir complément A_{VI}).

très éloignée de toutes les autres valeurs propres discrètes de H_0 . Nous allons calculer

$$G_b(z) = \langle b;0 | G(z) | b;0 \rangle \quad (\text{C.2})$$

pour en déduire ensuite, grâce à l'intégrale de contour (A.22), l'amplitude de probabilité

$$U_b(\tau) = \langle b;0 | U(\tau) | b;0 \rangle \quad (\text{C.3})$$

pour que l'atome, initialement dans l'état b , reste dans cet état pendant un temps τ .

D'après la formule (B.8), $G_b(z)$ est égal à

$$G_b(z) = \frac{1}{z - E_b - R_b(z)} \quad (\text{C.4})$$

où $R_b(z)$ est donné par une expression analogue à (B.4). En électrodynamique quantique (voir § C-1 du chapitre I), $V = H_{I1} + H_{I2}$ où H_{I1} et H_{I2} sont d'ordre 1 et 2 vis-à-vis des charges q_α (nous négligeons ici les effets liés aux spins, décrits par H_{I1}^S). Comme dans le paragraphe B-3-a, remplaçons $R_b(z)$ par son expression à l'ordre 2 en q_α qui s'écrit

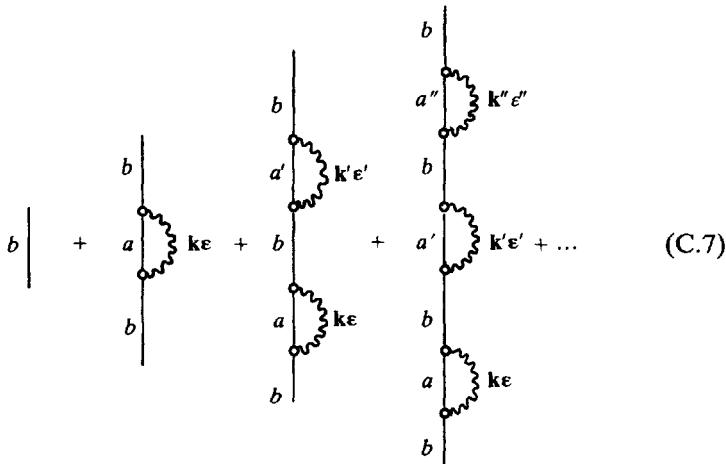
$$\hat{R}_b(z) = \langle b;0 | H_{I2} | b;0 \rangle + \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{\langle b;0 | H_{I1} | a;\mathbf{k}\epsilon \rangle \langle a;\mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | b;0 \rangle}{z - E_a - \hbar\omega} \quad (\text{C.5})$$

où $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ représente l'atome dans l'état interne a en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$. A l'approximation des grandes longueurs d'onde, le premier terme de (C.5) se réduit à une constante indépendante de b , donnée par l'expression (E.5) du chapitre II et que nous supposerons intégrée dans H_0 . L'expression (C.5) se réduit alors au dernier terme, dont la représentation diagrammatique (analogue à (B.41)) est

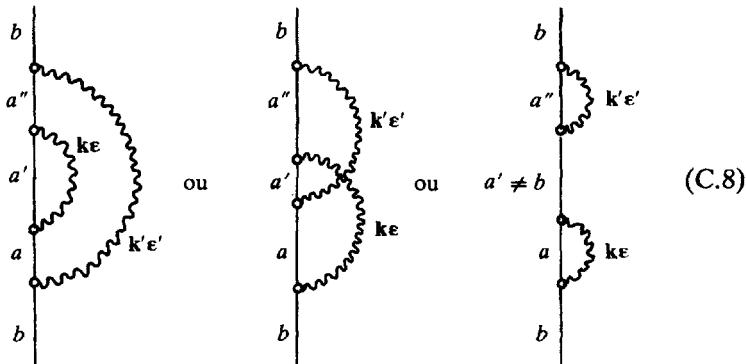


le trait pointillé de (B.41) étant remplacé ici par l'ensemble d'une ligne droite représentant l'atome dans l'état a et d'une ligne ondulée représentant le photon $\mathbf{k}\epsilon$. Le remplacement de $R_b(z)$ par $\hat{R}_b(z)$ dans

(C.4) revient donc à resommer dans $G_b(z)$ l'ensemble des termes



Sont ainsi négligés tous les processus où plusieurs états intermédiaires (au lieu d'un seul) apparaissent entre deux états $|b;0\rangle$ (représentés par une simple ligne atomique b sans ligne ondulée de photons), par exemple



Calculons maintenant la valeur de $\hat{R}_b(z)$ au voisinage de l'axe réel. Le dernier terme de l'équation (C.5) donne

$$\hat{R}_b(E \pm i\eta) = \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | b; 0 \rangle|^2}{E \pm i\eta - E_a - \hbar\omega} \quad (C.9)$$

Compte tenu de (B.35), il vient alors

$$\hat{R}_b(E \pm i\eta) = \hbar \hat{\Delta}_b(E) \mp i\hbar \frac{\hat{\Gamma}_b(E)}{2} \quad (C.10)$$

avec

$$\hat{\Delta}_b(E) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{II} | b; 0 \rangle|^2}{E - E_a - \hbar\omega} \quad (\text{C.11})$$

$$\hat{\Gamma}_b(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{II} | b; 0 \rangle|^2 \delta(E - E_a - \hbar\omega) \quad (\text{C.12})$$

de sorte que l'expression approchée de $G_b(E \pm i\eta)$ s'écrit

$$G_b(E \pm i\eta) \approx \frac{1}{E \pm i\eta - E_b - \hbar\hat{\Delta}_b(E) \pm i\frac{\hbar}{2}\hat{\Gamma}_b(E)} \quad (\text{C.13})$$

Avant d'aller plus loin, soulignons quelque propriétés importantes des fonctions $\hat{\Gamma}_b(E)$ et $\hat{\Delta}_b(E)$. Tout d'abord, il découle des équations (C.11) et (C.12) que

$$\hat{\Delta}_b(E) = \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int dE' \frac{\hat{\Gamma}_b(E')}{E - E'} \quad (\text{C.14})$$

La relation (C.14) est une *relation de dispersion* entre les deux fonctions $\hat{\Delta}_b(E)$ et $\hat{\Gamma}_b(E)$ qui sont transformées de Hilbert l'une de l'autre. Par ailleurs, il apparaît clairement sur (C.12) que $\hat{\Gamma}_b(E)$ est positif et n'est différent de zéro que pour $E > E_a$ (puisque $E_a + \hbar\omega$ varie entre E_a et $+\infty$). En fait, $\hat{\Gamma}_b(E) dE$ caractérise l'intensité du couplage entre l'état initial $|b; 0\rangle$ et l'ensemble des états finals $|a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ ayant une énergie comprise entre E et $E + dE$. Comme les densités d'états et les éléments de matrice de H_{II} varient en général lentement avec l'énergie E , il s'ensuit que $\hat{\Gamma}_b(E)$, et par suite $\hat{\Delta}_b(E)$, sont des fonctions lentement variables de E . Enfin, pour $E = E_b$, $\hat{\Delta}_b(E)$ et $\hat{\Gamma}_b(E)$ prennent des valeurs, que nous noterons Δ_b et Γ_b , qui sont données par

$$\Delta_b = \hat{\Delta}_b(E_b) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{II} | b; 0 \rangle|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega} \quad (\text{C.15})$$

$$\Gamma_b = \hat{\Gamma}_b(E_b) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_a \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{II} | b; 0 \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) \quad (\text{C.16})$$

et dont l'interprétation physique est très claire : $\hbar\Delta_b$ est le déplacement (au second ordre en q) de l'état b , dû au couplage avec le rayonnement. Γ_b est la probabilité par unité de temps d'émission spontanée d'un photon de l'état b vers un état a d'énergie inférieure.

b) DURÉE DE VIE ET DÉPLACEMENT RADIATIFS

Revenons maintenant à l'expression (C.13) de $G_b(E \pm i\eta)$ et introduisons l'approximation supplémentaire consistant à remplacer les fonctions $\hat{F}_b(E)$ et $\hat{\Delta}_b(E)$, qui sont des fonctions lentement variables de E , par les valeurs qu'elles prennent au voisinage de $E = E_b$. On obtient ainsi

$$G_b(E \pm i\eta) \simeq \frac{1}{E - E_b - \hbar\Delta_b \pm i \frac{\hbar}{2}\Gamma_b} \quad (\text{C.17})$$

L'intégrale de contour (A.22) de (C.17) donne alors

$$U_b(\tau) = e^{-i(E_b + \hbar\Delta_b)\tau/\hbar} e^{-\Gamma_b|\tau|/2} \quad (\text{C.18})$$

L'expression (C.17) peut encore s'écrire

$$G_b(E \pm i\eta) \simeq \frac{1}{E - \tilde{E}_b \pm i \hbar \frac{\Gamma_b}{2}} \quad (\text{C.19.a})$$

où

$$\tilde{E}_b = E_b + \hbar\Delta_b \quad (\text{C.19.b})$$

est l'énergie de l'état b corrigée du déplacement radiatif $\hbar\Delta_b$. Les résultats annoncés dans le paragraphe A-1-c du chapitre II sont ainsi démontrés : l'état excité b est déplacé et la probabilité de présence de l'atome dans l'état excité décroît exponentiellement avec une durée de vie $\tau_b = 1/\Gamma_b$. En fait, les divers termes de la somme partielle infinie (C.7) correspondent par transformée de Fourier aux divers termes du développement de l'exponentielle (C.18) en puissances de Δ_b et Γ_b . Si l'on avait arrêté le développement de perturbation à un certain ordre n , on aurait obtenu un polynôme en t , et non une décroissance exponentielle. Il apparaît ainsi clairement qu'un traitement non perturbatif est indispensable pour rendre compte de la décroissance exponentielle des états excités.

c) CONDITIONS DE VALIDITÉ DU TRAITEMENT PRÉCÉDENT

Dans les deux paragraphes précédents, nous avons introduit deux approximations pour parvenir à l'expression (C.18) de $U_b(\tau)$. Tout d'abord, nous avons remplacé dans l'expression exacte (C.4) de $G_b(z)$, $R_b(z)$ par l'expression approchée $\hat{R}_b(z)$ donnée en (C.5). Puis, nous avons négligé les variations avec E de $\hat{R}_b(E \pm i\eta)$ et remplacé $\hat{R}_b(E \pm i\eta)$ par $\hat{R}_b(E_b \pm i\eta) = \hbar\Delta_b \mp i\hbar\Gamma_b/2$.

Commençons par étudier la deuxième approximation. Examinons le résultat que l'on obtiendrait pour $U_b(\tau)$ si l'on ne négligeait pas la dépendance en E de $\hat{R}_b(E \pm i\eta)$. Au lieu de (C.17), nous utilisons donc maintenant (C.13). D'après (A.21), $U_b(\tau)$ est, à un coefficient près, la transformée de Fourier de $G_{b-}(E) - G_{b+}(E)$. De manière plus précise, les relations (A.21), (A.19) et (C.13) permettent d'écrire

$$U_b(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{U}_b(E) e^{-iE\tau/\hbar} \quad (\text{C.20.a})$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_b(E) &= \frac{1}{2\pi i} [G_{b-}(E) - G_{b+}(E)] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \underset{\eta \rightarrow 0^+}{\text{Lim}} [G_b(E - i\eta) - G_b(E + i\eta)] \\ &= \underset{\eta \rightarrow 0^+}{\text{Lim}} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\hbar \hat{I}_b(E)}{2} + \eta}{[E - E_b - \hbar \hat{\Delta}_b(E)]^2 + \left[\frac{\hbar \hat{I}_b(E)}{2} + \eta \right]^2} \quad (\text{C.20.b}) \end{aligned}$$

Pour que la décroissance exponentielle de $U_b(\tau)$ décrite par (C.18) soit valable, il faudrait que les variations de $\mathcal{U}_b(E)$ avec E soient celles d'une lorentzienne. Or, il est clair sur (C.20.b) que $\mathcal{U}_b(E)$ ne coïncide pas en général avec une lorentzienne (*). Pour que l'approximation lorentzienne soit valable dans (C.20.b), il faut que $\hat{I}_b(E)$ et $\hat{\Delta}_b(E)$ varient très peu quand E varie autour de $E_b + \hbar \Delta_b$ sur un intervalle de quelques $\hbar \Gamma_b$. $\mathcal{U}_b(E)$ est alors très proche de la lorentzienne conduisant à (C.18), sur un intervalle de valeurs de E égal à plusieurs fois la largeur de cette lorentzienne. Pour exprimer de manière précise la condition précédente, appelons $\hbar w_0$ l'intervalle d'énergie au bout duquel $\hat{I}_b(E)$ et $\hat{\Delta}_b(E)$ varient de manière appréciable. Par exemple, si l'état b est le premier état excité et a l'état fondamental, $\hbar w_0$ est de l'ordre de $E_b - E_a$. Il faut alors que

$$w_0 \gg \Gamma_b, \Delta_b \quad (\text{C.21})$$

Lorsque $|E - E_b|$ n'est plus négligeable devant $\hbar w_0$, il n'est plus possible de négliger dans (C.20.b) les variations avec E de $\hat{I}_b(E)$ et

(*) Pour qu'il en soit ainsi, il faudrait que $\hat{I}_b(E)$ soit indépendant de E , $\hat{\Delta}_b(E)$ étant alors nul d'après (C.14). Une telle situation correspond en fait à celle du modèle simple de continuum choisi dans le Complément C_f.

$\hat{\Delta}_b(E)$ qui font que les ailes de $\mathcal{U}_b(E)$ ne sont plus celles d'une lorentzienne. Les corrections correspondantes à la décroissance exponentielle sont étudiées dans le complément C_{III} , où l'on prend pour $\hat{\Gamma}_b(E)$ une courbe en forme de cloche, de largeur $\hbar w_0$.

Il nous reste à examiner l'autre approximation utilisée plus haut et consistant à remplacer $R_b(z)$ par l'expression perturbative écrite en (C.5). L'infiniment petit qui caractérise le développement perturbatif (B.4) de $R_b(z)$ est H_{I1}/H_0 , c'est-à-dire encore en ordre de grandeur $[\Gamma/w_0]^{\frac{1}{2}}$ puisque $\Gamma \sim H_{I1}^2/w_0$. L'inégalité (C.21) entraîne que, si les premiers termes (C.5) du développement perturbatif de $R_b(z)$ sont non nuls, les termes suivants peuvent être négligés.

Notons enfin que la structure (C.20.b) de $\mathcal{U}_b(E)$ demeure valable même si $R_b(E \pm i\eta)$ n'est pas approximé par $\hat{R}_b(E \pm i\eta)$ (voir remarque ii du paragraphe 3 du complément A_{III}).

2. Distribution spectrale des photons émis spontanément par un atome excité

a) ÉLÉMENT DE MATRICE DE LA RÉSOLVANTE ASSOCIÉ AU PROCESSUS ÉTUDIÉ

Nous nous proposons ici de calculer l'élément de matrice de $G(z)$

$$\langle a; \mathbf{k}\epsilon | G(z) | b; 0 \rangle \quad (\text{C.22})$$

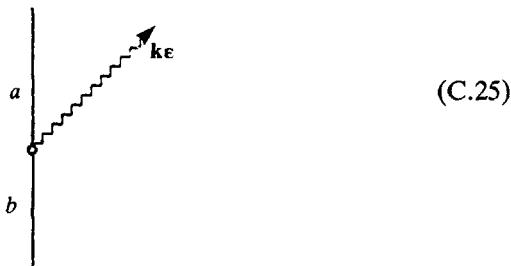
entre l'état initial $|b; 0\rangle$ (atome dans l'état excité b dans le vide de photons) et l'état final $|a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ (atome dans l'état a en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$). Nous supposerons que a est l'état fondamental et b le premier niveau excité, la transition $b \rightarrow a$ étant permise. Une fois que (C.22) est calculé, l'amplitude de probabilité pour que l'atome ait émis un photon $\mathbf{k}\epsilon$ au bout d'un temps τ en passant de b à a est obtenue par l'intégrale de contour (A.22). Si τ est positif, seul le contour C_+ intervient et

$$\langle a; \mathbf{k}\epsilon | U(\tau) | b; 0 \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{+\infty}^{-\infty} dE e^{-iE\tau/\hbar} \langle a; \mathbf{k}\epsilon | G(E + i\eta) | b; 0 \rangle \quad (\text{C.23})$$

Le premier terme non nul du développement (A.24) permettant de relier $|b; 0\rangle$ à $|a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ est le terme $G_0 H_{I1} G_0$, ce qui donne :

$$\langle a; \mathbf{k}\epsilon | G(z) | b; 0 \rangle = \frac{1}{z - E_a - \hbar\omega} \langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | b; 0 \rangle \frac{1}{z - E_b} \quad (\text{C.24})$$

qui peut être représenté par le diagramme



déjà introduit dans le chapitre II (voir figure 1).

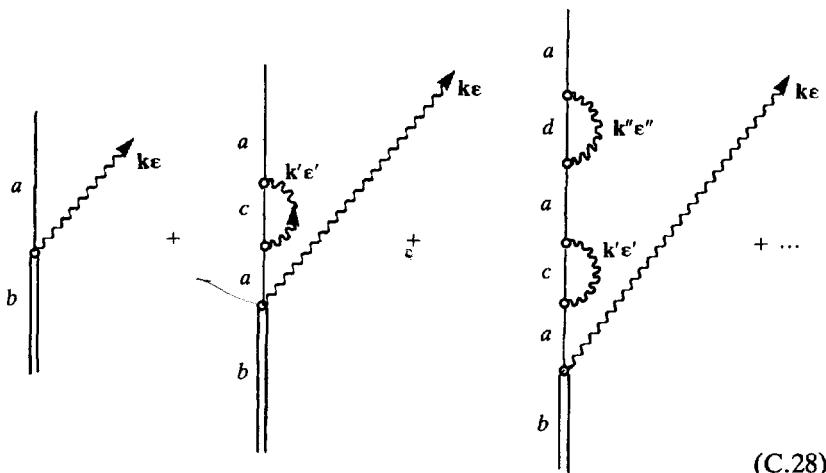
Soit \mathcal{E}_0 le sous-espace sous-tendu par $|b;0\rangle$. Comme $|a;k\epsilon\rangle$ appartient au sous-espace supplémentaire \mathcal{S}_0 , l'élément de matrice (C.22) est un élément de matrice de $Q G(z) P$. L'utilisation de (B.30) permet alors d'obtenir pour (C.22) l'expression *exacte*.

$$\langle a;k\epsilon | G(z) | b;0 \rangle = \langle a;k\epsilon | \frac{1}{z - QHQ} V | b;0 \rangle \langle b;0 | G(z) | b;0 \rangle \quad (C.26)$$

Le dernier élément de matrice de (C.26) a déjà été étudié dans le paragraphe précédent et nous avons obtenu pour ce terme une expression approchée (C.17), qui est non perturbative puisqu'elle resomme tous les diagrammes représentés en (C.7). Pour $z = E + i\eta$, l'expression (C.26) s'écrit compte tenu de (C.19.a)

$$\begin{aligned} \langle a;k\epsilon | G(E + i\eta) | b;0 \rangle &= \\ &= \langle a;k\epsilon | \frac{1}{E + i\eta - QHQ} V | b;0 \rangle \frac{1}{E - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}} \quad (C.27) \end{aligned}$$

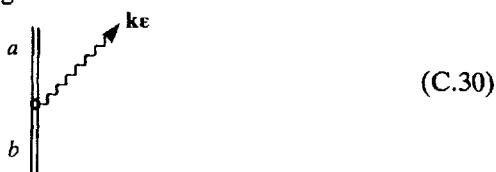
Considérons maintenant le premier élément de matrice de (C.27). Pour l'évaluer, nous nous contenterons ici (comme dans le paragraphe B-1 ci-dessus) de considérer des sous-ensembles de diagrammes issus du développement de $G(E + i\eta)$ en puissances de H_{11} . Nous pouvons ainsi essayer de resommer tous les diagrammes où l'état final $|a;k\epsilon\rangle$ apparaît un nombre arbitraire de fois, ce qui fait apparaître un nombre arbitraire de dénominateurs en $1/(z - E_a - \hbar\omega)$ analogues à celui figurant dans (C.24). Par contre, entre deux tels états $|a;k\epsilon\rangle$, nous ne gardons au plus qu'un état « non résonnant », c'est-à-dire différent de $|b;0\rangle$ ou $|a;k\epsilon\rangle$. Plus précisément, nous nous limitons à la somme infinie de diagrammes du type (C.28)



où le double trait b représente le propagateur perturbé de l'état initial correspondant au dernier terme de (C.27) et représentant symboliquement la somme infinie (C.7). Les diagrammes représentés en (C.28) suggèrent l'image suivante : une fois que le photon ke a été émis, l'atome dans l'état a émet et réabsorbe virtuellement des photons en permanence. De tels processus sont responsables du déplacement radiatif de l'état fondamental a . Notons qu'il n'y a pas d'instabilité pour l'état a car il n'y a pas d'état d'énergie inférieure vers lequel l'atome puisse se désintégrer radiativement à partir de a . Comme le photon ke est « spectateur » dans (C.28), on peut se convaincre aisément que la sommation de tous les diagrammes (C.28) conduit, avec les mêmes approximations que celles utilisées pour établir (C.17), à remplacer le premier dénominateur de (C.24) (écrit pour $z = E + i\eta$) par $1/(E + i\eta - \tilde{E}_a - \hbar\omega)$, où \tilde{E}_a est l'énergie E_a corrigée du déplacement radiatif $\hbar\Delta_a$ de l'état a . Une approximation de l'expression exacte (C.26), meilleure que (C.24), est donc finalement

$$\langle a;ke | G(E + i\eta) | b;0 \rangle = \frac{\langle a;ke | H_{II} | b;0 \rangle}{(E + i\eta - \tilde{E}_a - \hbar\omega)(E - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2})} \quad (C.29)$$

et est représentée par le diagramme



où les deux doubles traits représentent les propagateurs perturbés de l'état initial et de l'état final. Une approche plus directe que celle suivie ici, définissant de manière rigoureuse l'état final perturbé, est présentée dans le complément B_{III} .

Avant d'étudier la répartition spectrale du rayonnement émis, nous allons auparavant généraliser l'expression (C.29) au cas où la désintégration radiative de l'état excité initial fait apparaître plusieurs photons dans l'état final.

b) GÉNÉRALISATION À UNE CASCADE RADIATIVE

Nous considérons maintenant le cas où l'atome part d'un niveau c plus excité que b et retourne à l'état fondamental a en émettant deux photons $\mathbf{k}_1 \epsilon_1$ et $\mathbf{k}_2 \epsilon_2$ (voir les figures 2 α et 2 β représentant les deux ordres temporels possibles d'émission des deux photons).

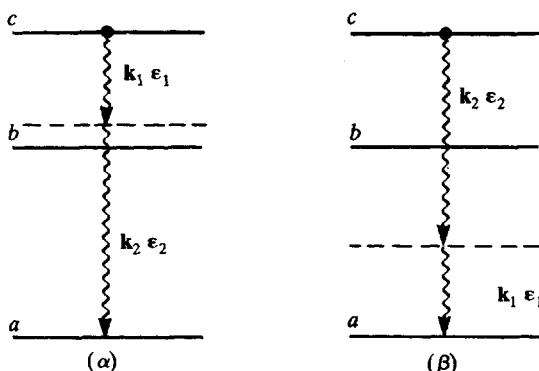


Figure 2. Passage de l'état excité c à l'état fondamental a par émission spontanée de deux photons $\mathbf{k}_1 \epsilon_1$ et $\mathbf{k}_2 \epsilon_2$. Les deux processus (α) et (β) diffèrent par l'ordre d'émission des deux photons.

La présence d'un niveau b situé entre c et a entraîne que l'amplitude des processus (2α) et (2β) peut prendre des valeurs importantes à cause d'une résonance dans l'état intermédiaire. C'est ce qui se passe quand la fréquence ω_1 du photon $\mathbf{k}_1 \epsilon_1$ pour le processus (2α) , ou la fréquence ω_2 du photon $\mathbf{k}_2 \epsilon_2$ pour le processus (2β) , sont très voisines de la fréquence ω_{cb} de la transition $c \rightarrow b$, l'atome passant intermédiairement dans l'état b . Une telle situation correspond à une cascade radiative $c \rightarrow b \rightarrow a$.

Nous supposerons dans ce qui suit que les fréquences atomiques ω_{cb} et ω_{ba} sont très nettement différentes (l'écart $|\omega_{cb} - \omega_{ba}|$ étant très grand devant les largeurs naturelles Γ_c et Γ_b de c et b). Les deux

amplitudes associées aux processus (2α) et (2β) ne peuvent pas alors être simultanément importantes (*). Nous supposerons ω_1 voisin de ω_{cb} et négligerons le processus (2β) . Le photon $\mathbf{k}_1 \epsilon_1$ est alors celui qui est émis en premier dans la transition $c \rightarrow b$.

L'élément de matrice

$$\langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | G(z) | c; 0 \rangle \quad (\text{C.31})$$

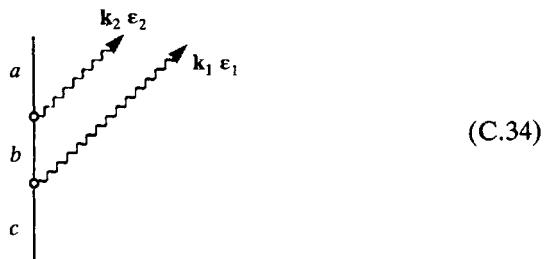
permet de calculer l'amplitude de transition

$$\begin{aligned} & \langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | U(\tau) | c; 0 \rangle = \\ & = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{2\pi i} \int_{+\infty}^{-\infty} dE e^{-iE\tau/\hbar} \langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | G(E + i\eta) | c; 0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

A l'ordre le plus bas en H_{II} , le troisième terme du développement (A.25) donne, pour la contribution du processus (2α) à l'amplitude (C.31), le résultat

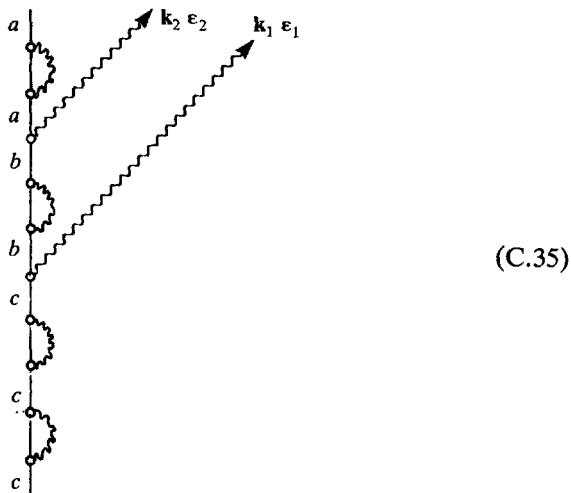
$$\frac{\langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | H_{II} | b; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 \rangle \langle b; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 | H_{II} | c; 0 \rangle}{(z - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 - E_a)(z - \hbar\omega_1 - E_b)(z - E_c)} \quad (\text{C.33})$$

représenté par le diagramme



Comme dans le paragraphe précédent, nous pouvons resommer les autres diagrammes d'ordre plus élevé, du type de (C.35), contenant un nombre arbitraire de fois les états « résonnantes » $|c;0\rangle$, $|b;\mathbf{k}_1 \epsilon_1\rangle$, $|a;\mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2\rangle$ comme états intermédiaires et ne contenant au plus qu'un état non résonnant entre deux tels états résonnants.

(*) Voir cependant la remarque à la fin de ce paragraphe et l'exercice 15 qui considèrent la situation où les trois niveaux a, b, c sont à peu près équidistants.



Comme plus haut, on peut montrer qu'une telle resommation revient à remplacer dans le dénominateur de (C.33) (écrit pour $z = E + i\eta$), E_i par $\tilde{E}_i - i\hbar(\Gamma_i/2)$ avec $i = a, b, c$. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} & \langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | H_{l1} | b; \mathbf{k}_1, \epsilon_1 \rangle \langle b; \mathbf{k}_1, \epsilon_1 | H_{l1} | c; 0 \rangle \times \\ & \times \left(\frac{1}{E + i\eta - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 - \tilde{E}_a} \right) \left(\frac{1}{E + i\eta - \hbar\omega_1 - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}} \right) \times \\ & \times \left(\frac{1}{E + i\eta - \tilde{E}_c + i\hbar \frac{\Gamma_c}{2}} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

correspondant au diagramme obtenu en remplaçant dans (C.34) les trois simples traits $a b c$ par trois doubles traits symbolisant des propagateurs perturbés (voir le premier diagramme de (C.46)).

Des méthodes plus algébriques, utilisant des opérateurs de projection sur plusieurs sous-espaces orthogonaux peuvent être mises en oeuvre pour étudier le problème des cascades radiatives. Elles confirment les résultats établis ici par des méthodes diagrammatiques (*).

(*) Voir par exemple L. Mower Phys. Rev. **142**, 799 (1966). A.S. Goldhaber and K.M. Watson, Phys. Rev. **160**, 1151 (1967). L. Mower, Phys. Rev. **165**, 145 (1968).

c) LARGEUR NATURELLE ET DÉPLACEMENT DES RAIRES ÉMISES

a) *Raié émise à partir du premier niveau excité*

Revenons à l'émission spontanée d'un seul photon à partir du premier niveau excité b .

Pour obtenir la distribution spectrale du photon émis, il faut calculer l'amplitude d'émission (C.23) pour un temps τ suffisamment long pour que l'atome soit certainement retombé dans l'état a ($\tau \gg \Gamma_b^{-1}$), puis étudier la dépendance en ω du carré du module de cette amplitude.

Reportons (C.29) dans (C.23) et calculons l'intégrale sur E par la méthode des résidus. Pour $\tau \gg \Gamma_b^{-1}$, seul le pôle en $\tilde{E}_a + \hbar\omega$ de (C.29) contribue, et on obtient

$$\langle a; \mathbf{k}\epsilon | U(\tau) | b; 0 \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\langle a; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | b; 0 \rangle}{\omega - \tilde{\omega}_{ba} + i \frac{\Gamma_b}{2}} e^{-i(\tilde{E}_a + \hbar\omega)\tau/\hbar} \quad (\text{C.37})$$

où

$$\tilde{\omega}_{ba} = (\tilde{E}_b - \tilde{E}_a)/\hbar \quad (\text{C.38})$$

représente la fréquence (angulaire) de la transition reliant l'état b déplacé de $\hbar\Delta_b$ à l'état a déplacé de $\hbar\Delta_a$. Elevons au carré le module de (C.37). La dépendance en ω du numérateur est beaucoup plus lente que celle du dénominateur et peut être négligée. La répartition en fréquence $I(\omega)$ des photons émis est donc proportionnelle à

$$\frac{1}{(\omega - \tilde{\omega}_{ba})^2 + (\Gamma_b/2)^2} \quad (\text{C.39})$$

Elle est donnée par une courbe de Lorentz de largeur à mi-hauteur Γ_b , appelée *largeur naturelle*, centrée en $\tilde{\omega}_{ba}$, qui diffère de ω_{ba} par le déplacement $\Delta_b - \Delta_a$.

b) *Raiées émises dans une cascade radiative*

Pour obtenir la répartition spectrale des deux photons émis dans la cascade radiative $c \rightarrow b \rightarrow a$ (voir Fig. 2a), il faut maintenant reporter (C.36) dans (C.32). Pour $\tau \gg \Gamma_c^{-1}, \Gamma_b^{-1}$, seul le pôle en $\tilde{E}_a + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$ contribue à l'intégrale et on obtient

$$\begin{aligned} \langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | U(\tau) | c; 0 \rangle &= e^{-i(\tilde{E}_a + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2)\tau/\hbar} \times \\ &\times \frac{\langle a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1, \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | H_{I1} | b; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 \rangle \langle b; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 | H_{I1} | c; 0 \rangle}{(\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 + \tilde{E}_a - \tilde{E}_c + i\hbar \frac{\Gamma_c}{2})(\hbar\omega_2 + \tilde{E}_a - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2})} \end{aligned} \quad (\text{C.40})$$

Comme plus haut, il est légitime de négliger la variation avec ω_1 et ω_2 du numérateur devant celle du dénominateur, de sorte que la distribution combinée $I(\omega_1, \omega_2)$ des fréquences des deux photons émis est donnée par

$$I(\omega_1, \omega_2) \sim \frac{1}{\left[(\omega_1 + \omega_2 - \tilde{\omega}_{ca})^2 + \frac{\Gamma_c^2}{4} \right] \left[(\omega_2 - \tilde{\omega}_{ba})^2 + \frac{\Gamma_b^2}{4} \right]} \quad (\text{C.41})$$

où $\tilde{\omega}_{ba}$ est déjà donnée en (C.38) et où

$$\tilde{\omega}_{ca} = (\tilde{E}_c - \tilde{E}_a)/\hbar \quad (\text{C.42})$$

Supposons que l'on n'observe que le premier photon ω_1 . Sa distribution spectrale s'obtient en intégrant $I(\omega_1, \omega_2)$ sur ω_2

$$I(\omega_1) = \int d\omega_2 I(\omega_1, \omega_2) \quad (\text{C.43})$$

L'intégrale sur ω_2 de (C.41) peut être calculée aisément par la méthode des résidus. Il vient

$$I(\omega_1) \sim \frac{1}{(\omega_1 - \tilde{\omega}_{cb})^2 + \left(\frac{\Gamma_b + \Gamma_c}{2} \right)^2} \quad (\text{C.44})$$

où

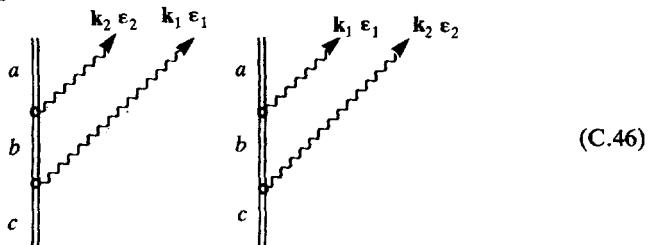
$$\tilde{\omega}_{cb} = (\tilde{E}_c - \tilde{E}_b)/\hbar \quad (\text{C.45})$$

La répartition spectrale des photons émis sur la transition $c \rightarrow b$ est donnée par une lorentzienne centrée en $\tilde{\omega}_{cb}$ et dont la largeur à mi-hauteur est la somme des largeurs naturelles Γ_c et Γ_b associées aux deux niveaux supérieur et inférieur de la transition.

Si par contre on n'observe que le photon ω_2 , il faut intégrer (C.41) sur ω_1 . On retrouve alors le même résultat que celui donné en (C.39).

Remarque

En toute rigueur, l'amplitude d'émission des deux photons est représentée par une somme de deux diagrammes différent par l'ordre d'émission des deux photons



Ces deux diagrammes correspondent aux deux processus de la figure 2 et décrivent deux chemins différents faisant passer du même état initial au même état final. Les amplitudes correspondantes doivent donc interférer. En fait, si $|\tilde{\omega}_{cb} - \tilde{\omega}_{ba}| \gg \Gamma_c, \Gamma_b$, les deux amplitudes ne peuvent jamais être simultanément importantes, de sorte que les effets d'interférence sont négligeables. Le calcul précédent est alors valable. Par contre, si les trois niveaux a, b, c , sont équidistants, les deux amplitudes associées à (C.46) peuvent être comparables et leur interférence ne peut plus être ignorée. Un exemple d'une telle situation est analysé dans l'exercice 15 qui étudie l'émission spontanée en cascade à partir du niveau $n = 2$ d'un oscillateur harmonique.

3. Couplage indirect entre un niveau discret et un continuum. Exemple de la transition de Lamb

a) PRÉSENTATION DU PROBLÈME

Nous considérons maintenant le cas où un niveau discret $|\varphi_c\rangle$ de H_0 est couplé à un continuum, non pas directement (comme dans les paragraphes précédents) mais indirectement, via un autre niveau discret $|\varphi_b\rangle$ de H_0 , d'énergie voisine. Cette situation se rencontre par exemple dans l'atome d'hydrogène, le niveau métastable $2 s_{\frac{1}{2}}$ étant très proche en énergie du niveau instable $2 p_{\frac{1}{2}}$ (voir figure 3). Nous allons montrer dans ce paragraphe qu'un faible couplage entre ces deux niveaux peut conduire à une réduction importante de la métastabilité du niveau $2 s_{\frac{1}{2}}$ (*).

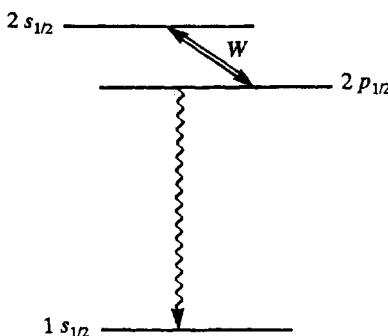


Figure 3. Schéma des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène considérés dans ce paragraphe. Les niveaux $2 s_{\frac{1}{2}}$ et $2 p_{\frac{1}{2}}$ sont quasi-dégénérés. Le niveau $2 p_{\frac{1}{2}}$ peut se désexciter vers le niveau $1 s_{\frac{1}{2}}$ en émettant un photon. Le niveau $2 s_{\frac{1}{2}}$ est métastable en absence de couplage W .

(*) En fait, l'état $2 s_{\frac{1}{2}}$ peut se désintégrer radiativement vers l'état $1 s_{\frac{1}{2}}$ par un processus d'émission spontanée à deux photons (voir chapitre II, § D-1). Nous négligerons ici un tel processus car l'instabilité introduite par le couplage avec l'état instable $2 p_{\frac{1}{2}}$ est beaucoup plus importante.

Le problème que nous considérons est donc celui d'un niveau discret $|\varphi_c\rangle = |c;0\rangle$ de $H_0 = H_P + H_R$ (atome dans l'état excité c en présence de 0 photon), couplé par un hamiltonien W à un autre niveau discret d'énergie voisine $|\varphi_b\rangle = |b;0\rangle$ (atome dans l'état excité b en présence de 0 photon), lui-même couplé par H_{I1} à un continuum d'états $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ (atome dans l'état fondamental a en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$). Nous supposons par contre que $|\varphi_c\rangle$ n'est pas couplé directement à $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ par H_{I1} et est donc métastable vis à vis de l'émission spontanée. Un système préparé initialement dans l'état $|\varphi_c\rangle$ doit donc passer intermédiairement par l'état $|\varphi_b\rangle$ avant de pouvoir émettre un photon. Il apparaît ainsi clairement que l'évolution de l'état $|\varphi_c\rangle$ ne peut être étudiée indépendamment de celle de l'état $|\varphi_b\rangle$. Nous sommes donc dans une situation où le sous-espace \mathcal{E}_0 privilégié est engendré par $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ et a donc une dimension égale à 2.

Pour l'exemple de l'hydrogène, nous supposerons que le couplage W entre les états $|\varphi_c\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ est dû à un champ électrique statique \mathbf{E}_0 extérieur, de sorte que

$$W = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 \quad (\text{C.47})$$

où \mathbf{d} est le moment dipolaire électrique de l'atome.

Remarques

(i) La théorie développée ci-dessous peut être aisément adaptée au cas où le couplage entre $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ est dû à un champ électromagnétique hyperfréquence dont la fréquence est voisine de $(E_c - E_b)/\hbar$. Si nous supposons qu'il y a initialement N photons dans ce mode $\mathbf{k}_1\epsilon_1$ du champ et que l'atome est dans l'état c , le couplage entre $|c;N\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$ et $|b;(N+1)\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$ peut induire une transition entre ces niveaux. Comme le niveau $|b;(N+1)\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$ est instable, puisque couplé au continuum d'états $|a;(N+1)\mathbf{k}_1\epsilon_1, \mathbf{k}\epsilon\rangle$, l'évolution du système est décrite par des équations analogues à celles que l'on obtient dans le cas du couplage Stark (C.47). Le sous-espace \mathcal{E}_0 particularisé est alors engendré par $|c;N\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$ et $|b;(N+1)\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$.

(ii) Nous mettons ici l'accent sur l'instabilité de l'état $|\varphi_c\rangle$ induite par le couplage W . Une autre approche possible consisterait à déterminer d'abord les états propres $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ de la restriction de $H_0 + W$ dans le sous-espace \mathcal{E}_0 engendré par $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$, puis à étudier l'effet du couplage radiatif entre les états $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ ainsi obtenus et le continuum $\{|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle\}$. Il serait cependant incorrect de penser que l'évolution de $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ puisse se déduire exclusivement des éléments de matrice diagonaux $\langle \chi_1 | R(E + i\eta) | \chi_1 \rangle$ et $\langle \chi_2 | R(E + i\eta) | \chi_2 \rangle$. Les états $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ étant proches en énergie et couplés au même continuum $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$, il faut également tenir compte des éléments non diagonaux $\langle \chi_1 | R(E + i\eta) | \chi_2 \rangle$ et $\langle \chi_2 | R(E + i\eta) | \chi_1 \rangle$. Un autre exemple physique où deux niveaux dégénérés sont couplés de manière

résonnante à un même continuum est étudié dans l'exercice 14 qui aborde le problème de la superradiance et de la subradiance d'un système de deux atomes.

b) CALCUL NON PERTURBATIF DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION

Le système étant à l'instant initial dans l'état $|\varphi_c\rangle$, nous nous proposons de calculer l'amplitude de probabilité $\langle\varphi_c|U(t,0)|\varphi_c\rangle = U_{cc}(t)$ de le trouver dans le même état à un instant t ultérieur. Pour cela, nous considérons au préalable $\langle\varphi_c|G(z)|\varphi_c\rangle = G_{cc}(z)$.

Comme les évolutions des états $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ sont couplées, il faut étudier la restriction de $G(z)$ dans le sous-espace \mathcal{E}_0 sous-tendu par $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$. Il découle alors du paragraphe B-2-b ci-dessus que la matrice (B.28) représentant $P G(z) P$ est l'inverse de la matrice (B.29). Elle est donc égale à

$$\begin{pmatrix} G_{bb}(z) & G_{bc}(z) \\ G_{cb}(z) & G_{cc}(z) \end{pmatrix} = \frac{1}{\mathcal{D}} \begin{pmatrix} z - E_c - R_{cc}(z) & R_{bc}(z) \\ R_{cb}(z) & z - E_b - R_{bb}(z) \end{pmatrix} \quad (C.48)$$

où

$$\mathcal{D} = [z - E_b - R_{bb}(z)] [z - E_c - R_{cc}(z)] - R_{bc}(z) R_{cb}(z) \quad (C.49)$$

est le déterminant de la matrice (B.29).

Dans le problème physique étudié ici, l'hamiltonien H est la somme de $H_0 = H_P + H_R$ et de $V = H_{I1} + H_{I2} + W$. Comme dans le paragraphe C-1, nous allons effectuer des approximations sur les expressions exactes (C.48) et (C.49). Nous remplaçons les éléments de matrice R_{ij} de R (avec $i, j = b$ ou c) par des expressions perturbatives \hat{R}_{ij} , calculées à l'ordre 2 inclus vis-à-vis des charges q . Le long du contour C_+ de la figure 1 (qui intervient pour $\tau > 0$), nous négligeons également la variation avec E de $\hat{R}_{ij}(E + i\eta)$, en remplaçant $\hat{R}_{ij}(E + i\eta)$ par $\hat{R}_{ij}(E_0 + i\eta)$ où $E_0 = (E_b + E_c)/2$ est l'énergie moyenne des états $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$.

Commençons par calculer l'élément non diagonal $\hat{R}_{bc}(E_0 + i\eta)$. L'hamiltonien H_{I2} , qui n'agit pas sur les particules à l'approximation des grandes longueurs d'onde, ne peut pas coupler $|\varphi_b\rangle$ à $|\varphi_c\rangle$. Quant à H_{I1} , il ne peut coupler $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ au deuxième ordre, car les états atomiques $|b\rangle$ et $|c\rangle$ ont des parités opposées. Enfin, les termes de couplage « croisés » en H_{I1} et W sont nuls entre les états $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ qui sont tous les deux vides de photons. On en déduit que, à

l'ordre 2 inclus en q

$$\hat{R}_{bc}(E_0 + i\eta) = W_{bc} \quad (\text{C.50.a})$$

$$\hat{R}_{cb}(E_0 + i\eta) = W_{cb} \quad (\text{C.50.b})$$

En ce qui concerne les éléments diagonaux \hat{R}_{bb} et \hat{R}_{cc} , nous négligerons l'effet Stark quadratique dû aux éléments de matrice de W entre l'état $|b\rangle$ (ou $|c\rangle$) et les autres niveaux éloignés. Comme les termes diagonaux croisés en H_{I1} et W sont nuls, et que $E_0 = E_b = E_c$, on obtient

$$\begin{aligned} \hat{R}_{bb}(E_0 + i\eta) &= \langle b;0 | H_{I2} | b;0 \rangle + \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle a;\mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | b;0 \rangle|^2}{E_b + i\eta - E_a - \hbar\omega} \\ &= \hbar \Delta_b - i \frac{\hbar\Gamma_b}{2} \end{aligned} \quad (\text{C.50.c})$$

et de même

$$\hat{R}_{cc}(E_0 + i\eta) = \hbar \Delta_c \quad (\text{C.50.d})$$

L'absence de terme imaginaire dans $\hat{R}_{cc}(E_0 + i\eta)$ est due au fait que l'état $|c\rangle$ est métastable.

Finalement, les approximations faites plus haut sur $P R(E + i\eta) P$ reviennent à considérer que $P G(z) P$ est la résolvante de l' $\langle\langle$ hamiltonien $\rangle\rangle$ $P H_0 P + P \hat{R}(E_0 + i\eta) P$ qui est représenté par la matrice

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} & W_{bc} \\ W_{cb} & \tilde{E}_c \end{pmatrix} \quad (\text{C.51})$$

(où nous avons posé comme plus haut $\tilde{E}_i = E_i + \hbar \Delta_i$ pour $i = b, c$). La matrice (C.51) apparaît ainsi comme un hamiltonien effectif non hermitique permettant d'étudier l'évolution à l'intérieur du sous-espace \mathcal{E}_0 .

Le report de (C.50) dans (C.48) et (C.49) donne

$$G_{cc}(E + i\eta) = \frac{E - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}}{\left(E - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \right) (E - \tilde{E}_c) - |W_{bc}|^2} \quad (\text{C.52})$$

Pour obtenir $U_{cc}(\tau)$, il suffit alors d'effectuer l'intégrale de contour

(A.22) par la méthode des résidus. On obtient ainsi

$$U_{cc}(\tau) = \frac{\left(z_2 - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}\right) e^{-iz_2\tau/\hbar} - \left(z_1 - \tilde{E}_b + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}\right) e^{-iz_1\tau/\hbar}}{z_2 - z_1} \quad (\text{C.53})$$

où z_1 et z_2 sont les valeurs propres de la matrice (C.51).

c) CAS D'UN COUPLAGE FAIBLE. FORMULE DE BETHE

Considérons d'abord le cas où $|W_{bc}|$ est très petit devant $\hbar\Gamma_b$ ($|W_{bc}| \ll \hbar\Gamma_b$). Les valeurs propres de (C.51) sont alors respectivement égales à :

$$z_1 \approx \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} + \frac{|W_{bc}|^2}{(\tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}) - \tilde{E}_c} \quad (\text{C.54.a})$$

$$z_2 \approx \tilde{E}_c - \frac{|W_{bc}|^2}{(\tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2}) - \tilde{E}_c} \quad (\text{C.54.b})$$

Séparons les parties réelles et imaginaires de ces valeurs propres. Nous voyons apparaître ainsi les quantités

$$\Delta' = -\tilde{\omega}_{bc} \frac{|W_{bc}|^2}{\hbar^2 (\tilde{\omega}_{bc}^2 + \frac{\Gamma_b^2}{4})} \quad (\text{C.55})$$

$$\Gamma' = \Gamma_b \frac{|W_{bc}|^2}{\hbar^2 (\tilde{\omega}_{bc}^2 + \frac{\Gamma_b^2}{4})} \quad (\text{C.56})$$

dont la signification sera donnée plus tard (rappelons que $\hbar \tilde{\omega}_{bc} = \tilde{E}_b - \tilde{E}_c$), et nous obtenons

$$\begin{aligned} z_1 &\approx \tilde{E}_b - \hbar \Delta' - i \hbar \frac{\Gamma_b}{2} \left(1 - \frac{\Gamma'}{\Gamma_b}\right) \\ &\approx \tilde{E}_b - \hbar \Delta' - i \hbar \frac{\Gamma_b}{2} \end{aligned} \quad (\text{C.57.a})$$

$$z_2 \approx \tilde{E}_c + \hbar \Delta' - i \hbar \frac{\Gamma'}{2} \quad (\text{C.57.b})$$

Dans le cas d'un couplage faible, Γ' et Δ' sont très petits devant Γ_b et les valeurs propres z_1 et z_2 diffèrent peu des termes diagonaux de

l'hamiltonien effectif (C.51), même lorsque la différence d'énergie $\hbar\tilde{\omega}_{bc}$ entre les niveaux b et c est nulle. En portant les valeurs de z_1 et z_2 dans l'expression (C.53) donnant $U_{cc}(t)$, on trouve que la contribution essentielle provient du pôle z_2 , de sorte que :

$$U_{cc}(t) \simeq e^{-i(\frac{\tilde{E}_c}{\hbar} + \Delta')t} e^{-\Gamma' \frac{t}{2}} \quad (\text{C.58})$$

Il ressort de (C.58) que le couplage W a deux conséquences pour le niveau c : d'une part, ce niveau est déplacé de la quantité $\hbar\Delta'$, d'autre part, il acquiert une durée de vie finie $1/\Gamma'$. Par suite de son couplage avec b , le niveau c est « contaminé » par b et devient donc instable. Nous voyons sur la formule (C.56), encore appelée *formule de Bethe*, que la probabilité de désintégration radiative par unité de temps Γ' varie avec $\tilde{\omega}_{bc}$ comme une courbe lorentzienne centrée en $\tilde{\omega}_{bc} = 0$. Cette probabilité est maximum lorsqu'il y a égalité entre les énergies des niveaux b et c (déplacements radiatifs inclus). En revanche, la variation de Δ' en fonction de $\tilde{\omega}_{bc}$ est celle d'une courbe de dispersion (voir (C.55)). Bien que couplés entre eux, les niveaux d'énergie continuent à se croiser en $\tilde{\omega}_{bc} = 0$ quand on balaie les énergies \tilde{E}_b et \tilde{E}_c au moyen d'un paramètre extérieur (*). La perturbation W ne lève donc pas la dégénérescence des niveaux d'énergie lorsqu'elle est petite devant $\hbar\Gamma_b$. De même, on trouve que les états propres $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ de la matrice (C.51) diffèrent peu de $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ (les corrections étant au maximum de l'ordre de $|W_{bc}|/\hbar\Gamma_b$) :

$$|\varphi_1\rangle \simeq |\varphi_b\rangle + \frac{W_{cb}}{\hbar \left(\tilde{\omega}_{bc} - i \frac{\Gamma_b}{2} \right)} |\varphi_c\rangle \quad (\text{C.59.a})$$

$$|\varphi_2\rangle \simeq |\varphi_c\rangle - \frac{W_{bc}}{\hbar \left(\tilde{\omega}_{bc} - i \frac{\Gamma_b}{2} \right)} |\varphi_b\rangle \quad (\text{C.59.b})$$

Notons que ces deux états ne sont pas orthogonaux car la matrice (C.51) n'est pas hermitique.

(*) Dans le cas de l'hydrogène, un tel balayage est réalisé par déplacement Zeeman des niveaux dans un champ magnétique statique. Voir W.E. Lamb and R.C. Rutherford, Phys. Rev. 79, 549 (1950); 81, 222 (1951); 86, 1014 (1952).

d) CAS D'UN COUPLAGE FORT. OSCILLATION DE RABI

Considérons à présent l'autre situation limite où $|W_{bc}| \gg \hbar\Gamma_b$. Dans ce cas, les valeurs propres z_1 et z_2 de (C.51) sont égales à

$$z_1 = \tilde{E}_0 + \hbar \frac{\Omega}{2} - i\hbar \frac{\Gamma_1}{2} \quad (\text{C.60.a})$$

$$z_2 = \tilde{E}_0 - \hbar \frac{\Omega}{2} - i\hbar \frac{\Gamma_2}{2} \quad (\text{C.60.b})$$

avec

$$\tilde{E}_0 = \frac{\tilde{E}_b + \tilde{E}_c}{2} \quad (\text{C.61})$$

$$\Omega = \frac{1}{\hbar} \sqrt{4|W_{bc}|^2 + \hbar^2 \tilde{\omega}_{bc}^2} \quad (\text{C.62})$$

$$\Gamma_1 = \frac{\Gamma_b}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\omega}_{bc}}{\Omega} \right) \quad (\text{C.63.a})$$

$$\Gamma_2 = \frac{\Gamma_b}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\omega}_{bc}}{\Omega} \right) \quad (\text{C.63.b})$$

Le report de ces valeurs de z_1 et z_2 dans (C.53) donne l'amplitude de transition $U_{cc}(t)$. A résonance ($\tilde{\omega}_{bc} = 0$), on trouve que

$$U_{cc}(t) = e^{-i\tilde{E}_0 t / \hbar} e^{-\Gamma_b t / 4} \cos \frac{|W_{bc}| t}{\hbar} \quad (\text{C.64})$$

L'évolution du système à partir de l'état $|\varphi_c\rangle$ se présente donc comme une oscillation de Rabi amortie. La fréquence de l'oscillation est proportionnelle à l'élément de matrice de couplage $|W_{bc}|$ et le temps d'amortissement de l'oscillation est le double de la durée de vie du niveau b . Sous l'effet du couplage intense entre les deux états, l'instabilité du niveau b se trouve répartie également entre b et c . Les états propres de la matrice (C.51) sont dans ce cas des combinaisons linéaires symétrique et antisymétrique de $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ (si W_{bc} est réel). Leurs énergies sont $\tilde{E}_0 \pm |W_{bc}|$. Contrairement au cas précédent (couplage faible), la dégénérescence entre les deux niveaux b et c est donc levée par W .

Si l'on s'écarte de résonance, le mélange des fonctions d'onde devient moins important et les états propres de (C.51) tendent vers $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ quand $\hbar |\tilde{\omega}_{bc}| \gg |W_{bc}|$. Les largeurs naturelles Γ_1 et Γ_2 de ces niveaux (relées aux parties imaginaires de (C.60.a) et (C.60.b)) passent alors progressivement de $\Gamma_b/2$ et $\Gamma_b/2$ à Γ_b et $\Gamma_c = 0$ (voir (C.63.a) et (C.63.b)). Les énergies (parties réelles de (C.60.a) et (C.60.b)), quant à elles, valent $(\tilde{E}_0 \pm \hbar\Omega)/2$ et forment un « anticroisement de niveaux »

quand $\tilde{\omega}_{bc}$ varie (voir figure 4). L'oscillation de Rabi s'effectue à la fréquence Ω donnée en (C.62) et son amplitude diminue.

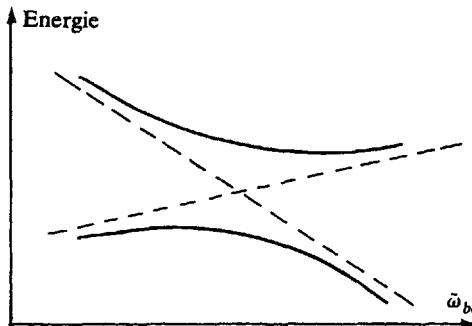


Figure 4. Anticroisement de niveaux. Les niveaux d'énergie non perturbés par W sont tracés en traits tiretés et les niveaux d'énergie perturbés en traits pleins.

Remarque

Dans tout le paragraphe, nous avons considéré que $|\varphi_c\rangle$ était stable en absence de couplage W . Les résultats obtenus peuvent être aisément étendus au cas où $|\varphi_c\rangle$ a une durée de vie égale à Γ_c^{-1} . Il faut dans ce cas ajouter une partie imaginaire $-i\hbar\Gamma_c/2$ au terme diagonal \tilde{E}_c de l'hamiltonien effectif (C.51). La situation d'anticroisement de niveaux correspond alors à l'inégalité $|W_{bc}| \gg \hbar|\Gamma_b - \Gamma_c|$. En particulier, lorsque les deux niveaux ont même durée de vie, le couplage entre $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$ conduit toujours à un anticroisement de niveaux.

4. Couplage indirect entre deux niveaux discrets. Les transitions multiphotoniques

a) PHÉNOMÈNE PHYSIQUE ÉTUDIÉ ET SOUS-ESPACE \mathcal{E}_0 DES ÉTATS PRIVILÉGIÉS

Le but de ce dernier paragraphe est de montrer comment le formalisme de la résolvante peut être appliqué à l'étude des transitions multiphotoniques. Considérons par exemple le cas d'une absorption résonnante à deux photons entre deux niveaux excités discrets c et b (voir figure 5). La différence d'énergie $E_b - E_c = \hbar\omega_{bc}$ entre ces niveaux est voisine de $2\hbar\omega$ où ω est la fréquence des N photons incidents $\mathbf{k}\epsilon$. Nous supposons que le niveau inférieur de la transition c est métastable alors que le niveau supérieur b peut se désexciter par une cascade radiative, via des niveaux d , vers le niveau fondamental

a. Un tel schéma correspond par exemple au cas de la transition $2s \rightarrow 3s$ de l'atome d'hydrogène, la désexcitation radiative du niveau $3s$ se faisant presque totalement via le niveau $2p$.

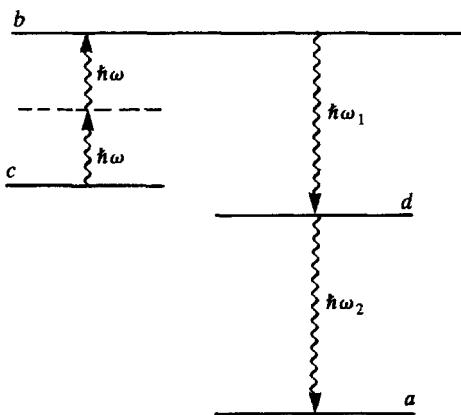


Figure 5. Schéma des niveaux correspondant au processus d'absorption à deux photons considéré dans ce paragraphe.

Soit $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état du système global atome + champ, correspondant à l'état initial $|\psi(0)\rangle = |c;N\mathbf{k}\epsilon\rangle$ (atome dans l'état c en présence de N photons du mode $\mathbf{k}\epsilon$, tous les autres modes étant vides). Parmi les états propres de $H_0 = H_P + H_R$ qui vont apparaître avec une amplitude importante dans le développement de $|\psi(t)\rangle$, l'état $|b;(N-2)\mathbf{k}\epsilon\rangle$ joue un rôle prépondérant puisque la condition $\omega_{bc} \approx 2\omega$ entraîne que cet état est quasi-dégénéré avec $|c;N\mathbf{k}\epsilon\rangle$. D'autres états vont également jouer un rôle important aux temps longs : ce sont ceux qui résultent de l'émission spontanée d'un photon à partir du niveau excité b ($|d;(N-2)\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$) ou de deux photons ($|a;(N-2)\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}_1\epsilon_1, \mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$).

Notons que ces deux derniers états du système global ne font pas intervenir les états atomiques b et c . De manière plus générale, s'il est possible de négliger tous les processus d'émission spontanée susceptibles de ramener l'atome dans les niveaux b et c , ces deux niveaux atomiques n'apparaissent dans le développement de $|\psi(t)\rangle$ que via les états $|\varphi_b\rangle = |b;(N-2)\mathbf{k}\epsilon\rangle$ et $|\varphi_c\rangle = |c;N\mathbf{k}\epsilon\rangle$. La probabilité de trouver l'atome dans le niveau b ou c (quel que soit l'état du champ) est donc égale à celle de trouver le système total dans l'état $|\varphi_b\rangle$ ou $|\varphi_c\rangle$. Le calcul de l'opérateur d'évolution, et donc de la résolvante, peut être alors limité au sous-espace \mathcal{E}_0 sous-tendu par $|\varphi_b\rangle$ et

$|\varphi_c\rangle$. Une telle simplification ne serait pas possible si le niveau atomique c était l'état fondamental car il serait repeuplé par émission spontanée. Il faudrait alors faire intervenir beaucoup d'autres états du système global pour décrire l'évolution atomique (voir § C-4-f).

b) CALCUL NON PERTURBATIF DES AMPLITUDES DE TRANSITION

Nous choisissons ici le point de vue dipolaire électrique pour décrire le couplage entre l'atome et le champ (*). L'hamiltonien H est alors décomposé en $H_0 = H_P + H_R$ et $H'_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp$.

Pour déterminer l'évolution du système, il faut, comme dans le paragraphe C-3-b, calculer au préalable les valeurs propres de l'hamiltonien effectif $P H_0 P + P R(E_0 + i\eta) P$ où E_0 est l'énergie moyenne des niveaux $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$. Les éléments de matrice de $P R(E_0 + i\eta) P$, sont calculés ici à l'ordre le plus bas en q_α où ils sont non nuls, c'est-à-dire à l'ordre 2 dans le problème présent.

Pour les termes diagonaux, nous avons ainsi

$$\begin{aligned} \hat{R}_{bb}(E_0 + i\eta) &= \\ &\sum_i \sum_{\substack{\mathbf{k}'\epsilon' \neq \\ \mathbf{k}\epsilon}} \frac{|\langle b; (N-2)\mathbf{k}\epsilon | H'_I | i; (N-2)\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon' \rangle|^2}{E_b - E_i - \hbar\omega' + i\eta} + \\ &+ \sum_i \frac{|\langle b; (N-2)\mathbf{k}\epsilon | H'_I | i; (N-1)\mathbf{k}\epsilon \rangle|^2}{E_b - E_i - \hbar\omega + i\eta} + \\ &+ \sum_i \frac{|\langle b; (N-2)\mathbf{k}\epsilon | H'_I | i; (N-3)\mathbf{k}\epsilon \rangle|^2}{E_b - E_i + \hbar\omega + i\eta} \end{aligned} \quad (C.65)$$

Dans la somme sur $\mathbf{k}'\epsilon'$ du premier terme de (C.65), les photons $\mathbf{k}\epsilon$ sont spectateurs. A l'exception de la contribution du seul mode $\mathbf{k}\epsilon$ (qui peut être négligée) nous trouvons ainsi une somme analogue à (C.9) et qui décrit donc les effets radiatifs spontanés (**) (durée de vie, déplacement radiatif) déjà étudiés dans le paragraphe C-1.

Dans les deux dernières sommes de (C.65), il est possible de supprimer le terme $i\eta$ au dénominateur. En effet, dans l'exemple

(*) On peut en effet montrer (voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 2 du complément E_{IV}) que l'hamiltonien $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp$ est souvent plus commode que H_{II} pour l'étude des transitions multiphotoniques entre niveaux discrets.

(**) En toute rigueur, la première somme de (C.65) ne coïncide pas avec (C.9). Pour obtenir à partir de l'hamiltonien dipolaire électrique le déplacement radiatif correct $\hbar\Delta_b$, il faut ajouter à cette somme la contribution provenant du terme d'énergie propre dipolaire de l'hamiltonien dipolaire électrique (voir la formule (76) de l'appendice et l'exercice 7).

étudié ici, nous excluons toute résonance à un photon $\mathbf{k}\epsilon$ à partir de b de sorte qu'aucun dénominateur d'énergie ne peut s'annuler (*). Les deux derniers termes de (C.65) sont donc réels. Appelons $\hbar\Delta'_b$ leur somme. La quantité $\hbar\Delta'_b$ décrit en fait le déplacement lumineux du niveau $|\varphi_b\rangle$ dû à l'interaction avec les photons incidents. En supposant que le nombre de photons dans ce mode $\mathbf{k}\epsilon$ est très grand ($N \gg 1$) et en utilisant l'expression (89) de l'appendice donnant l'opérateur champ \mathbf{E}_\perp , nous pouvons réexprimer les deux derniers termes de (C.65) sous la forme :

$$\hbar\Delta'_b = \frac{N\hbar\omega}{2\varepsilon_0L^3} \sum_i |\langle b | \mathbf{d}\cdot\mathbf{e} | i \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_b - E_i - \hbar\omega} + \frac{1}{E_b - E_i + \hbar\omega} \right) \quad (\text{C.66})$$

soit encore en utilisant l'opérateur intensité $I = \mathbf{E}_\perp^{(-)} \cdot \mathbf{E}_\perp^{(+)}$ introduit dans le complément A_{II} :

$$\hbar\Delta'_b = \langle I \rangle \sum_i |\langle b | \mathbf{d}\cdot\mathbf{e} | i \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_b - E_i - \hbar\omega} + \frac{1}{E_b - E_i + \hbar\omega} \right) \quad (\text{C.67})$$

Le déplacement lumineux $\hbar\Delta'_c$ de l'autre niveau est donné par une expression analogue obtenue en remplaçant b par c .

En définitive, les termes diagonaux de l'hamiltonien effectif $P H_0 P + P \hat{R}(E_0 + i\eta) P$ s'écrivent (avec la notation $\tilde{E}_i = E_i + \hbar\Delta_i$ pour $i = b, c$) :

$$(N-2)\hbar\omega + \tilde{E}_b + \hbar\Delta'_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \quad (\text{C.68})$$

pour le niveau b et

$$N\hbar\omega + \tilde{E}_c + \hbar\Delta'_c \quad (\text{C.69})$$

pour le niveau c qui a été supposé métastable ($\Gamma_c = 0$).

Considérons à présent le terme non diagonal $\hat{R}_{bc}(E_0 + i\eta)$, qui est égal à

$$\begin{aligned} \hat{R}_{bc}(E_0 + i\eta) &= \\ &= \sum_i \frac{\langle b; (N-2)\mathbf{k}\epsilon | H'_I | i; (N-1)\mathbf{k}\epsilon \rangle \langle i; (N-1)\mathbf{k}\epsilon | H'_I | c; N\mathbf{k}\epsilon \rangle}{E_c + \hbar\omega - E_i + i\eta} \end{aligned} \quad (\text{C.70})$$

(*) Dans le cas où il y aurait un niveau i du continuum d'ionisation de l'atome tel que $E_i = E_b + \hbar\omega$, il faudrait conserver le terme en $i\eta$. La partie imaginaire de la dernière somme de (C.65) est alors associée à la durée de vie du niveau b due au processus de photoionisation.

Nous avons remplacé au dénominateur d'énergie E_0 par $N\hbar\omega + E_c$ (on aurait pu aussi prendre $E_0 = (N - 2)\hbar\omega + E_b$ qui est très peu différent). Notons que le terme en $i\eta$ des dénominateurs peut être supprimé puisqu'aucun niveau i n'est situé à égale distance des niveaux b et c (pas de résonance à un photon). Contrairement à la situation du paragraphe C-3, il n'y a pas ici de couplage direct entre les niveaux $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$, mais un couplage indirect d'ordre 2 via les états $|i;(N-1)k\rangle$. Dans l'hypothèse où $N \gg 1$, nous pouvons réécrire $R_{bc}(E_0)$ sous la forme :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{bc}(E_0) &= \frac{N\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_i \frac{\langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | i \rangle \langle i | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | c \rangle}{E_c + \hbar\omega - E_i} \\ &= \langle I \rangle \sum_i \frac{\langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | i \rangle \langle i | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | c \rangle}{E_c + \hbar\omega - E_i}\end{aligned}\quad (\text{C.71})$$

Finalement, l'hamiltonien effectif qui décrit l'évolution à l'intérieur de \mathcal{E}_0 s'écrit

$$(N - 2)\hbar\omega + \begin{pmatrix} \tilde{E}_b + \hbar\Delta'_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} & \hat{R}_{bc}(E_0) \\ \hat{R}_{cb}(E_0) & 2\hbar\omega + \tilde{E}_c + \hbar\Delta'_c \end{pmatrix} \quad (\text{C.72})$$

et présente beaucoup d'analogies avec l'hamiltonien (C.51) étudié au paragraphe précédent. Nous pouvons donc utiliser les résultats de ce paragraphe pour déterminer l'évolution temporelle des amplitudes de transition $U_{cc}(t)$ et $U_{bc}(t)$. Comme plus haut, nous envisagerons successivement le cas d'un couplage faible ($|\hat{R}_{bc}(E_0)| \ll \hbar\Gamma_b$) et celui d'un couplage fort ($|\hat{R}_{bc}(E_0)| \gg \hbar\Gamma_b$).

c) CAS D'UN COUPLAGE FAIBLE. PROBABILITÉ D'EXCITATION À DEUX PHOTONS PAR UNITÉ DE TEMPS

L'expression (C.58) montre que la population de l'état c décroît exponentiellement avec un taux relié à la partie imaginaire de la valeur propre de l'hamiltonien effectif (C.72) relative à l'état $|\varphi_c\rangle$ perturbé. Notons ici $-i\hbar\Gamma''/2$ la partie imaginaire de la valeur propre de (C.72) la plus proche de $N\hbar\omega + \tilde{E}_c + \hbar\Delta'_c$. Γ'' vaut

$$\Gamma'' = \Gamma_b \frac{|\hat{R}_{bc}(E_0)|^2}{\hbar^2 \left[(\tilde{\omega}_{bc} + \Delta'_b - \Delta'_c - 2\omega)^2 + \frac{\Gamma_b^2}{4} \right]} \quad (\text{C.73})$$

et représente la probabilité de transition par unité de temps due à l'excitation à deux photons. Notons que cette probabilité est maximum

lorsque

$$\hbar \tilde{\omega}_{bc} + \hbar (\Delta'_b - \Delta'_c) = 2\hbar\omega \quad (\text{C.74})$$

c'est-à-dire lorsque l'énergie des deux photons est résonnante avec la différence d'énergie entre les niveaux b et c , corrigée des déplacements radiatifs spontanés (inclus dans $\hbar\tilde{\omega}_{bc} = \tilde{E}_b - \tilde{E}_c$) et des déplacements lumineux $\hbar\Delta'_b$ et $\hbar\Delta'_c$.

La condition de résonance dépend donc des déplacements lumineux : il s'ensuit que le centre de la résonance à deux photons se déplace lorsque l'intensité lumineuse incidente change. La largeur à mi-hauteur de la résonance est $\hbar\Gamma_b$. Quant à la variation de Γ'' avec l'intensité lumineuse, elle est quadratique puisque $\hat{R}_{bc}(E_0)$ varie comme $\langle I \rangle$ (voir (C.71)). La probabilité de transition à deux photons est donc proportionnelle au carré de l'intensité incidente.

Remarque

Dans le cas d'un couplage faible ($|\hat{R}_{bc}(E_0)| \ll \hbar\Gamma_b$), c'est-à-dire lorsque la transition à deux photons n'est pas « saturée », les déplacements lumineux sont souvent petits devant la largeur naturelle $\hbar\Gamma_b$ des niveaux étudiés, ce qui permet d'utiliser les transitions à deux photons comme méthode de spectroscopie de haute résolution (voir chapitre II, § D-2). Une telle propriété résulte du fait que les déplacements lumineux $\hbar\Delta'_b$ et $\hbar\Delta'_c$ varient comme $\hat{R}_{bc}(E_0)$, proportionnellement à $\langle I \rangle$. Il existe alors de nombreuses situations où l'on peut avoir $|\Delta'_b - \Delta'_c| \ll \Gamma_b$ tout en ayant une probabilité de transition Γ'' non négligeable (*).

a) CAS D'UN COUPLAGE FORT. OSCILLATION DE RABI À DEUX PHOTONS

Dans le cas où $|\hat{R}_{bc}(E_0)| \gg \hbar\Gamma_b$, les valeurs propres de l'hamiltonien effectif (C.72) sont données par des expressions analogues à (C.60.a) et (C.60.b) mais où W_{bc} et $\tilde{\omega}_{bc}$ sont remplacés par $\hat{R}_{bc}(E_0)$ et $(\tilde{\omega}_{bc} + \Delta'_b - \Delta'_c - 2\omega)$. Par analogie avec les résultats obtenus dans le paragraphe C-3-d, on peut ainsi prévoir que l'évolution du système va se présenter comme une oscillation amortie entre les niveaux b et c . Par exemple, à résonance ($\tilde{\omega}_{bc} + \Delta'_b - \Delta'_c = 2\omega$), la probabilité de trouver le système dans l'état $|\varphi_c\rangle$ est égale à

$$e^{-\Gamma_b t/2} \cos^2 \frac{|\hat{R}_{bc}(E_0)|}{\hbar} t \quad (\text{C.75})$$

(*) Voir par exemple Grynberg, Cagnac et Biraben.

Le phénomène d'oscillation de Rabi apparaît donc également pour une résonance à deux photons. Cette oscillation s'effectue à la fréquence de Rabi généralisée $2|\hat{R}_{bc}(E_0)|/\hbar$ qui est, d'après (C.71), proportionnelle à l'intensité incidente.

e) TRANSITION MULTIPHOTONIQUE D'ORDRE PLUS ÉLEVÉ

L'approche précédente peut être aisément généralisée à une transition multiphotonique impliquant plus de deux photons.

Considérons par exemple la transition résonnante à trois photons entre les états $c = 2s$ et $b = 4f$ de l'atome d'hydrogène. Au voisinage de la résonance, les états $|\varphi_c\rangle = |c;N\hbar\epsilon\rangle$ et $|\varphi_b\rangle = |b;(N-3)\hbar\epsilon\rangle$ jouent un rôle prépondérant. Comme plus haut, les éléments diagonaux $R_{cc}(E_0 + i\eta)$ et $R_{bb}(E_0 + i\eta)$ (où E_0 est la moyenne des énergies de $|\varphi_b\rangle$ et $|\varphi_c\rangle$) apparaissent au second ordre en H'_I et représentent les largeurs naturelles et déplacements radiatifs spontanés de b et c , ainsi que les déplacements lumineux de ces niveaux. Par contre, $R_{bc}(E_0)$ n'apparaît maintenant qu'à l'ordre 3 en H'_I et vaut

$$\hat{R}_{bc}(E_0) = \left(\frac{N\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{3/2} \sum_{i,j} \frac{\langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | j \rangle \langle j | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | i \rangle \langle i | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | c \rangle}{(E_c + 2\hbar\omega - E_j)(E_c + \hbar\omega - E_i)} \quad (\text{C.76})$$

Suivant les valeurs relatives de $|\hat{R}_{bc}(E_0)|$ et $\hbar\Gamma_b$, on peut définir une probabilité de transition à trois photons par unité de temps (si $|\hat{R}_{bc}(E_0)| \ll \hbar\Gamma_b$) égale à

$$\Gamma'' = \Gamma_b \frac{|\hat{R}_{bc}(E_0)|^2}{\hbar^2 \left[(\tilde{\omega}_{bc} + \Delta'_b - \Delta'_c - 3\omega)^2 + \frac{\Gamma_b^2}{4} \right]} \quad (\text{C.77})$$

ou une oscillation de Rabi à trois photons (si $|\hat{R}_{bc}(E_0)| \gg \hbar\Gamma_b$) s'effectuant à la fréquence de Rabi généralisée $2|\hat{R}_{bc}(E_0)|/\hbar$.

Notons que, lorsque la transition n'est pas saturée, la probabilité de transition Γ'' est proportionnelle à $|\hat{R}_{bc}(E_0)|^2$ qui varie comme le cube de l'intensité lumineuse. Les déplacements lumineux jouent alors un rôle plus important que dans le cas des résonances à deux photons puisque l'élément de matrice de couplage $|\hat{R}_{bc}(E_0)|$ induisant la transition apparaît à un ordre de perturbation plus élevé que Δ'_b et Δ'_c .

f) LIMITES DU TRAITEMENT PRÉCÉDENT

Dans tous les exemples envisagés dans les paragraphes C-3 et C-4, nous avons pu étudier l'évolution du système en nous limitant à un petit nombre de niveaux privilégiés. Une telle situation est cependant loin d'être générale. Considérons à titre d'exemple une absorption résonnante à un photon à partir du niveau fondamental a . Appelons b le premier niveau excité et supposons qu'un seul mode du champ est peuplé, ce mode contenant N photons de fréquence ω voisine de $(E_b - E_a)/\hbar$. Pour trouver l'évolution du système, on pourrait être tenté de généraliser le traitement précédent en étudiant la restriction de la résolvante au sous-espace engendré par $|a;Nk\epsilon\rangle$ et $|b;(N-1)k\epsilon\rangle$. Il est clair cependant qu'une telle approche ne permet pas de prédire quelle est la probabilité de trouver l'atome dans l'un des niveaux a ou b . En effet, le processus d'émission spontanée à partir du niveau b couple l'état $|b;(N-1)k\epsilon\rangle$ à l'état $|a;(N-1)k\epsilon, k_1\epsilon_1\rangle$. Une nouvelle absorption à partir de ce niveau conduirait à l'état $|b;(N-2)k\epsilon, k_1\epsilon_1\rangle$ etc... Il n'est donc pas possible de se limiter aux seuls états $|a;Nk\epsilon\rangle$ et $|b;(N-1)k\epsilon\rangle$ (sauf à n'envisager que des temps suffisamment courts pour que la probabilité de retour par émission spontanée dans le niveau a soit négligeable). Pour ce type de problèmes, l'utilisation de la résolvante n'est pas commode car le sous-espace d'états privilégiés \mathcal{E}_0 a une dimension trop grande et il faut avoir recours à d'autres méthodes (équation pilote, équations de Bloch optiques, atome habillé) qui seront exposées dans les chapitres suivants.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

Messiah (§§ XVI-15, XXI-13, 14, 15), Goldberger and Watson (chapitre VIII), Roman (§ 4-5).

COMPLÉMENT A_{III}

PROPRIÉTÉS ANALYTIQUES DE LA RÉSOLVANTE

Dans la partie A de ce chapitre, nous avons introduit la résolvante

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (1)$$

de l'hamiltonien H du système étudié, z étant une variable complexe. Nous avons montré que cet opérateur possède plusieurs propriétés intéressantes. En particulier, ses éléments de matrice entre états propres de l'hamiltonien non perturbé H_0 sont souvent plus simples à calculer que ceux de l'opérateur d'évolution $U(\tau)$, ce qui permet notamment de resommer formellement la série de perturbations en puissances de $V = H - H_0$. Une fois que l'élément de matrice intéressant de $G(z)$ (entre les états initial et final du processus étudié) a été calculé, l'élément de matrice correspondant de $U(\tau)$ s'en déduit par une intégrale de contour. Il est donc important de préciser les propriétés analytiques des éléments de matrice de $G(z)$ considérés comme des fonctions de la variable complexe z . C'est là le but de ce complément.

Nous commençons (§ 1) par montrer que les éléments de matrice de $G(z)$ sont analytiques dans tout le plan complexe privé de l'axe réel. Nous analysons ensuite (§ 2) les singularités de ces éléments de matrice sur l'axe réel et montrons qu'elles sont liées à la nature discrète ou continue des valeurs propres de H . Nous reprenons enfin le problème d'un état discret de H_0 couplé à un continuum. Nous montrons tout d'abord que de tels états instables correspondent à des pôles du prolongement analytique de la résolvante dans le deuxième feuillet de Riemann (§ 3). Des décroissances exponentielles sont associées à ces pôles. Nous montrons ensuite (§ 4) que l'intégrale de contour donne aussi naissance à d'autres contributions, non exponentielles.

1. Analyticité de la résolvante en dehors de l'axe réel

Soit $|u\rangle$ un état quelconque normé

$$\langle u | u \rangle = 1 \quad (2)$$

et

$$G_u(z) = \langle u | G(z) | u \rangle = \langle u | \frac{1}{z - H} | u \rangle \quad (3)$$

l'élément de matrice de $G(z)$ dans cet état.

Pour étudier les propriétés analytiques de $G_u(z)$, il est commode d'introduire les états propres de H , dont certains, $|\psi_i\rangle$, sont des états propres discrets, de valeurs propres E_i , et d'autres, $|\psi_k\rangle$, appartiennent au spectre continu. Si les états $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_k\rangle$ ont la normalisation habituelle, la relation de fermeture sur les états propres de H s'écrit

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| + \int d^3k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| = 1 \quad (4.a)$$

Il est souvent commode de faire apparaître explicitement l'énergie E comme nombre quantique repérant les états du spectre continu, auquel il faut adjoindre d'autres nombres quantiques notés γ . Le changement de variables $\mathbf{k} \rightarrow E, \gamma$ fait apparaître alors la densité d'états dans $d^3k = \rho(E, \gamma) dE d\gamma$ (voir § 3-c du complément A_I) et (4.a) devient

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| + \int \int dE d\gamma \rho(E, \gamma) |\psi(E, \gamma)\rangle \langle \psi(E, \gamma)| = 1 \quad (4.b)$$

L'introduction de (4.b) entre $1/(z - H)$ et $|u\rangle$ dans (3) donne

$$\begin{aligned} G_u(z) = & \sum_i \frac{|\langle u | \psi_i \rangle|^2}{z - E_i} + \\ & + \int \int dE' d\gamma' \rho(E', \gamma') \frac{|\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle|^2}{z - E'} \end{aligned} \quad (5)$$

Supposons alors que z soit un point du plan complexe situé à une distance δ non nulle de l'axe réel. Dans (5), tous les dénominateurs $z - E_i$, $z - E'$... sont minorés en module par δ . Tous les numérateurs de (5) étant positifs, on peut donc majorer le module de $G_u(z)$

$$\begin{aligned} |G_u(z)| \leqslant & \frac{1}{\delta} \left[\sum_i |\langle u | \psi_i \rangle|^2 + \right. \\ & \left. + \int \int dE' d\gamma' \rho(E', \gamma') |\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle|^2 \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Le terme entre crochets de (6) n'est autre que le carré de la norme de $|u\rangle$, qui vaut 1 d'après (2), de sorte que

$$|G_u(z)| \leqslant \frac{1}{\delta} \quad (7)$$

Une démonstration analogue permettrait de montrer que la dérivée de $G_u(z)$, $G'_u(z)$, est elle aussi bornée.

Finalement, $G_u(z)$ qui est, d'après (5), une somme infinie de termes qui sont tous des fonctions analytiques de z en dehors de l'axe réel, est

bornée en dehors de cet axe de même que sa dérivée. $G_u(z)$ est donc analytique en dehors de l'axe réel.

Remarque

La démonstration précédente peut se généraliser pour les éléments de matrice de $G(z)$ entre deux états normés différents $|u\rangle$ et $|v\rangle$. L'inégalité (6) est alors remplacée par

$$|\langle u | G(z) | v \rangle| \leq \frac{1}{\delta} \left[\sum_i |\langle u | \psi_i \rangle \langle \psi_i | v \rangle| + \int \int dE' d\gamma' \rho(E', \gamma') |\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle \langle \psi(E', \gamma') | v \rangle| \right] \quad (6')$$

En utilisant pour chacun des produits $|\langle u | \psi \rangle \langle \psi | v \rangle|$ le fait que $|\langle u | \psi \rangle \langle \psi | v \rangle| \leq [\|\langle u | \psi \rangle\|^2 + \|\langle v | \psi \rangle\|^2]/2$, on obtient

$$|\langle u | G(z) | v \rangle| \leq 1/\delta \quad (7')$$

et la conclusion précédente reste valable.

2. Etude des singularités sur l'axe réel

Tout d'abord, en tout point E de l'axe réel qui n'est pas une valeur propre de H , $G_u(z)$ est analytique. Il suffit de remplacer, dans la démonstration précédente, δ par la distance entre E et la valeur propre de H la plus proche de E .

Lorsque z tend vers une valeur propre discrète E_i de H , le terme $|\langle u | \psi_i \rangle|^2/(z - E_i)$ de la somme (5) tend vers l'infini. Les valeurs propres discrètes de H sont donc des *pôles* pour $G_u(z)$ (sauf si $\langle u | \psi_i \rangle = 0$), admettant $|\langle u | \psi_i \rangle|^2$ pour résidus.

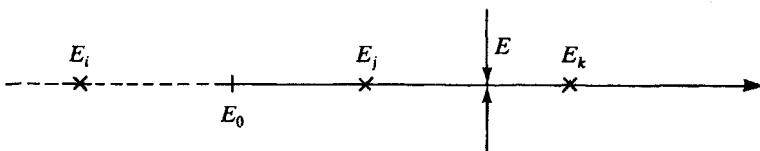


Figure 1 : Valeurs propres discrètes (E_i, E_j, \dots) et spectre continu de H (partant de E_0).

Supposons maintenant que z tende vers une valeur propre E du spectre continu, qui n'est pas confondue avec une valeur propre discrète. Deux situations sont possibles, suivant que la partie imaginaire de z est positive ou négative (figure 1). Pour le voir, calculons

$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} G_u(E \pm i\eta)$ qui, d'après (5), vaut

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} G_u(E \pm i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \left[\sum_i \frac{|\langle u | \psi_i \rangle|^2}{E \pm i\eta - E_i} + \int dE' \frac{f_u(E')}{E \pm i\eta - E'} \right] \quad (8)$$

où

$$f_u(E') = \int d\gamma' \rho(E', \gamma') |\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle|^2 \quad (9)$$

Le premier terme du second membre de (8) tend simplement, lorsque $\eta \rightarrow 0_+$, vers $\sum_i |\langle u | \psi_i \rangle|^2 / (E - E_i)$, qui est une grandeur réelle.

Quant au deuxième terme, l'utilisation de

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (10)$$

où \mathcal{P} désigne partie principale, montre qu'il vaut

$$\mathcal{P} \int dE' \frac{f_u(E')}{E - E'} \mp i\pi f_u(E) \quad (11)$$

Les limites de $G_u(E \pm i\eta)$, lorsque $\eta \rightarrow 0_+$, existent donc bien, mais ne sont pas les mêmes suivant que E tend vers E par valeurs positives ou négatives de la partie imaginaire (à condition que $f_u(E)$ soit non nul). On dit que la fonction $G_u(z)$ présente une *coupure* le long du spectre continu. L'écart, $-2i\pi f_u(E)$, entre les valeurs de $G_u(E + i\eta)$ et $G_u(E - i\eta)$, représente l'écart entre les deux lèvres de la coupure. Le point où commence la coupure, E_0 , s'appelle le point de branchement. Comme la densité d'états $\rho(E', \gamma)$ tend en général vers zéro quand E' tend vers E_0 , il en est de même pour $f_u(E')$ d'après (9). L'écart entre les deux lèvres de la coupure tend donc vers zéro quand E s'approche du point de branchement.

Notons également que les valeurs prises par la fonction $G_u(z)$ de part et d'autre de la coupure sont complexes conjuguées l'une de l'autre, d'après (11). De manière plus générale, l'hermiticité de H entraîne que :

$$G_u(z^*) = (G_u(z))^* \quad (12)$$

La fonction $G_u(z)$ est analytique dans le demi-plan supérieur. On peut la prolonger analytiquement au delà de la coupure dans le demi-plan inférieur. La valeur prise par la fonction prolongée par continuité est

différente de la valeur prise au même point par la détermination initiale de la fonction, puisque la coupure introduit justement une discontinuité dans cette détermination. On dit que $G_u(z)$ a été prolongée dans le deuxième feuillet de Riemann, le plan complexe initial constituant le premier feuillet de Riemann. Un prolongement analogue peut être fait du demi-plan inférieur vers le demi-plan supérieur.

En résumé, l'étude précédente a montré que la fonction $G_u(z)$ est analytique dans le plan complexe privé des valeurs propres discrètes de H , qui constituent des pôles, et du spectre continu de H qui constitue une coupure. Il est possible de prolonger analytiquement $G_u(z)$ au-delà de la coupure dans le deuxième feuillet de Riemann. La deuxième détermination $G_u^{II}(z)$ ainsi obtenue pour $G_u(z)$ peut posséder des pôles. Nous allons voir maintenant que ces pôles caractérisent les états instables résultant par exemple du couplage d'un état discret avec un continuum.

3. Etats instables et pôles du prolongement analytique

Revenons pour fixer les idées au problème de l'émission spontanée, étudié dans le paragraphe C-1. L'état discret $|\varphi_b\rangle = |b;0\rangle$, qui est état propre de l'hamiltonien non perturbé H_0 , de valeur propre E_b , représente l'atome dans l'état excité discret $|b\rangle$ dans le vide de photons $|0\rangle$. Il est couplé par H_{I1} aux états $|\alpha;k\epsilon\rangle$ qui représentent l'atome dans l'état α en présence d'un photon $k\epsilon$. Les états $|\alpha;k\epsilon\rangle$, d'énergie non perturbée $E_\alpha + \hbar\omega$, forment un continuum partant de E_α (pour simplifier, nous supposons qu'il n'y a pas d'autre état atomique que $|\alpha\rangle$ d'énergie inférieure à E_b).

L'élément de matrice de la résolvante non perturbée dans l'état $|\varphi_b\rangle$

$$G_{0b}(z) = \langle \varphi_b | \frac{1}{z - H_0} | \varphi_b \rangle = \frac{1}{z - E_b} \quad (13)$$

a un pôle en $z = E_b$. Quant à l'élément de matrice de $G(z)$ dans $|\varphi_b\rangle$, nous avons montré qu'il peut être mis sous la forme

$$G_b(z) = \frac{1}{z - E_b - R_b(z)} \quad (14)$$

et nous avons calculé, comme H_{I1} est très petit, une valeur approchée, $\hat{R}_b(z)$, de $R_b(z)$ donnée par (C.5), de sorte que

$$G_b(z) \simeq \frac{1}{z - E_b - \hat{R}_b(z)} \quad (15)$$

Au voisinage de l'axe réel, $G_b(z)$ peut s'écrire

$$G_b(E \pm i\eta) = \frac{1}{E \pm i\eta - E_b - \hbar \hat{\Delta}_b(E) \pm i \frac{\hbar}{2} \hat{\Gamma}_b(E)} \quad (16)$$

où $\hat{\Gamma}_b(E)$ est une fonction positive, nulle pour $E < E_a$, décrivant l'intensité du couplage de l'état discret $|\varphi_b\rangle$ avec la « couche » d'énergie E dans le continuum $\{|a;ke\rangle\}$ (voir (C.12)), et où $\hat{\Delta}_b(E)$ est reliée simplement à $\hat{\Gamma}_b(E)$ par la relation de dispersion (C.14). Pour $E = E_b$, $\hat{\Gamma}_b(E_b) = \Gamma_b$ et $\hbar \hat{\Delta}_b(E_b) = \hbar \Delta_b$ représentent respectivement la probabilité de désintégration radiative par unité de temps de $|\varphi_b\rangle$ vers le continuum et le déplacement radiatif de l'état $|\varphi_b\rangle$.

Il apparaît clairement sur (16) que $G_b(E + i\eta)$ et $G_b(E - i\eta)$ tendent vers des limites bien définies quand $\eta \rightarrow 0_+$, mais que ces limites sont différentes si $\hat{\Gamma}_b(E)$ est non nul, puisque

$$G_b(E + i\eta) - G_b(E - i\eta) = \frac{-i\hbar \hat{\Gamma}_b(E)}{[E - E_b - \hbar \hat{\Delta}_b(E)]^2 + [\hbar \hat{\Gamma}_b(E)/2]^2} \quad (17)$$

$G_b(z)$ admet donc une coupure sur l'axe réel, partant du point de branchement E_a (puisque $\hat{\Gamma}_b(E) = 0$ pour $E < E_a$) et allant jusqu'à l'infini.

Le fait que la singularité soit passée d'un pôle pour $G_{0b}(z)$ à une coupure pour $G_b(z)$ montre que H n'a plus, comme H_0 , d'état discret d'énergie voisine de E_b . Le couplage V a en quelque sorte « dissous » l'état discret $|\varphi_b\rangle$ dans le continuum. Il reste cependant un souvenir de l'état discret, qui se manifeste par les variations importantes de $G_b(E + i\eta)$ et $G_b(E - i\eta)$ quand E varie autour de $E_b + \hbar \Delta_b$. Nous allons montrer maintenant que ces variations importantes de $G_b(E \pm i\eta)$ sont en fait dues à l'existence d'un pôle dans le prolongement analytique de $G_b(z)$ au voisinage de $z = E_b$.

Remarques

- (i) L'écart (17) entre les deux lèvres de la coupure varie de manière importante avec E au voisinage de $E = E_b$. Ces variations, qui sont voisines de celles d'une lorentzienne centrée en $E_b + \hbar \Delta_b$ et de largeur $\hbar \Gamma_b$, ne sont autres que celles de la densité d'état discret $|\varphi_b\rangle$ dans le nouveau continuum. En effet, si $|\psi(E, \gamma)\rangle$ désigne l'état propre de l'hamiltonien total H de valeur propre E , les expressions générales (8), (9) et (11) démontrées ci-dessus montrent que, pour $|u\rangle = |\varphi_b\rangle$

$$G_b(E + i\eta) - G_b(E - i\eta) = -2i\pi \int d\gamma \rho(E, \gamma) |\langle \varphi_b | \psi(E, \gamma) \rangle|^2 \quad (18)$$

L'intégrale du second membre de (18) n'est autre que la densité d'état $|\varphi_b\rangle$ dans le nouveau continuum. La comparaison de (17) et (18) montre bien alors que cette densité est importante au voisinage de $E_b + \hbar\Delta_b$ et varie très rapidement avec E sur un intervalle de largeur $\hbar\Gamma_b$. Un tel résultat généralise celui obtenu dans le complément C₁ sur un modèle très simple.

(ii) Il est possible de calculer exactement $R_b(z)$ et donc d'obtenir pour $\Delta_b(E)$ et $\Gamma_b(E)$ des expressions plus générales que les expressions perturbatives $\hat{\Delta}_b(E)$ et $\hat{\Gamma}_b(E)$ données en (C.11) et (C.12). Il suffit pour cela d'utiliser les expressions générales (B.37) et (B.38) écrites dans le cas où le sous-espace \mathcal{F}_0 n'a qu'une dimension (on a alors $\Delta_b(E) = \Delta_{bb}(E)$ et $\Gamma_b(E) = \Gamma_{bb}(E)$). Si l'on insère entre les deux opérateurs V de (B.37) et (B.38) la relation de fermeture sur les états propres de l'opérateur QHQ , on obtient des expressions exactes ayant la même structure que (C.11) et (C.12), $|a;k\rangle$ étant remplacé par un état propre de QHQ et $E_a + \hbar\omega$ par la valeur propre correspondante. Il est possible ainsi de montrer que $\Gamma_b(E)$ est positif et non nul pour $E \geq \tilde{E}_a$, où \tilde{E}_a est l'énergie de l'état fondamental de QHQ , c'est-à-dire l'énergie E_a de l'état fondamental de H_0 , corrigée du déplacement radiatif de cet état. La coupure de $G_b(z)$ part donc de \tilde{E}_a et non de E_a . De même, on peut montrer que la relation de dispersion (C.14) demeure valable entre les fonctions exactes $\Delta_b(E)$ et $\Gamma_b(E)$.

Revenons maintenant à (15). Au voisinage de $z = E_b$, on peut, d'après (16), approximer $\hat{R}_b(z)$ par $\hbar[\Delta_b - i(\Gamma_b/2)]$ pour $\text{Im } z > 0$, et par $\hbar[\Delta_b + i(\Gamma_b/2)]$ pour $\text{Im } z < 0$

$$\begin{aligned} \text{Voisinage de } E_b \quad G_b(z) &\simeq \frac{1}{z - E_b - \hbar\Delta_b + i(\hbar\Gamma_b/2)} \\ \text{Im } z > 0 \end{aligned} \quad (19.a)$$

$$\begin{aligned} \text{Voisinage de } E_b \quad G_b(z) &\simeq \frac{1}{z - E_b - \hbar\Delta_b - i(\hbar\Gamma_b/2)} \\ \text{Im } z < 0 \end{aligned} \quad (19.b)$$

Il est clair sur (19) que $G_b(z)$ n'a pas de pôle dans le voisinage de E_b puisque la partie imaginaire du dénominateur n'est jamais nulle ($\text{Im } z$ et $\pm \hbar\Gamma_b/2$ ont toujours le même signe). Prolongeons maintenant analytiquement $G_b(z)$, donné par (19.a), du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur à travers la coupure. Au voisinage de E_b , la fonction prolongée dans le deuxième feuillet de Riemann, $G_b^{II}(z)$, a par continuité une forme très voisine de (19.a), mais le domaine de définition est maintenant étendu à $\text{Im } z < 0$

$$\begin{aligned} \text{Voisinage de } E_b \quad G_b^{II}(z) &\simeq \frac{1}{z - E_b - \hbar\Delta_b + i(\hbar\Gamma_b/2)} \\ \text{Im } z < 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Il est clair alors que $G_b^{II}(z)$ a un pôle dont la position est approximativement donnée par

$$z_0 \approx E_b + \hbar \Delta_b - i(\hbar \Gamma_b / 2) \quad (21)$$

On pourrait de même prolonger analytiquement (19.b) du demi-plan inférieur vers le demi-plan supérieur, et montrer que la fonction prolongée $G_b^{II}(z)$ a un pôle en z_0^* .

Nous voyons ainsi que le pôle de $G_{0b}(z)$, qui était en $z = E_b$ sur l'axe réel (voir (13)), n'a pas réellement disparu lors du passage de H_0 à H . L'effet du couplage V a été simplement de déplacer légèrement ce pôle dans le deuxième feuillet de Riemann. De façon générale, les états instables, c'est-à-dire les souvenirs des états discrets de H_0 couplés à des continuums, correspondent à des pôles du prolongement analytique de la résolvante (de tels états sont désignés également sous le nom de « résonances »).

4. Intégrale de contour et corrections à la décroissance exponentielle

Revenons à l'intégrale de contour qui permet de relier $U_b(\tau)$ à $G_b(z)$ (voir la figure 1 et l'expression (A.22) du chapitre). Si nous supposons $\tau > 0$, la contribution de C_- est nulle dans (A.22) (on peut refermer le contour vers $z = -i\infty$ et il n'y a pas de pôles dans le demi-plan inférieur). Le contour se réduit donc à C_+ , droite légèrement au dessus de l'axe réel et parcourue de droite à gauche, de sorte que si $\tau > 0$

$$U_b(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{+\infty+i\eta}^{-\infty+i\eta} G_b(z) e^{-iz\tau/\hbar} dz \quad (22)$$

Pour évaluer l'intégrale par la méthode des résidus, il faut fermer le contour vers le bas ((Im z) τ doit être négatif). Le contour passe alors nécessairement dans le deuxième feuillet de Riemann dans sa partie droite, puisque $G_b(z)$ a une coupure s'étendant de E_a à l'infini, alors que, dans sa partie gauche, il reste dans le premier feuillet de Riemann. Pour fermer le contour, il faut donc nécessairement revenir tourner autour du point de branchement de la coupure en $E = E_a$ (voir la figure 2).

Le contour enferme donc le pôle situé en z_0 dans le deuxième feuillet de Riemann et dont nous avons montré plus haut l'existence (nous supposerons que $G_b^{II}(z)$ n'a pas d'autre pôle à l'intérieur du contour). La contribution de ce pôle à l'intégrale de contour est une exponentielle amortie. La contribution du demi-cercle est nulle si son rayon est suffisamment grand. Enfin, la contribution du « lacet » L formé par le

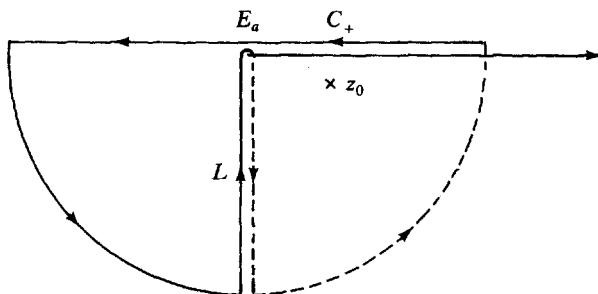


Figure 2. Fermeture vers le bas du contour d'intégration C_+ . Les parties en traits tiretés sont dans le deuxième feuillet de Riemann.

contour tournant autour du point de branchements s'écrit

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{E_a - i\infty}^{E_a} [G_b(z) - G_b^{II}(z)] e^{-iz\tau/\hbar} dz \quad (23)$$

Elle représente les corrections à la décroissance exponentielle associée au pôle en z_0 . L'expression (23) permet notamment de comprendre pourquoi la décroissance aux temps très longs ($\tau \gg \Gamma_b^{-1}$) de $U_b(\tau)$ est moins rapide qu'une exponentielle. En effet, pour τ très grand, l'exponentielle $\exp(-iz\tau/\hbar)$ amortit beaucoup plus la contribution du pôle que celle du lacet L , puisque le lacet comporte des régions où $\text{Im } z$ est aussi petit que l'on veut, alors que pour le pôle, $\text{Im } z$ reste égal à $\text{Im } z_0$. En fait, si $G_b(z) - G_b^{II}(z)$ varie en $(z - E_a)^n$ au voisinage de $z = E_a$, l'intégrale de (23) qui, pour $\tau \gg \Gamma_b^{-1}$, ne fait intervenir que ce voisinage, varie en $1/\tau^{n+1}$ (pour des raisons d'homogénéité).

RÉFÉRENCE GÉNÉRALE

Goldberger and Watson (chapitre VIII).

COMPLÉMENT B_{III}

**EXPRESSIONS NON PERTURBATIVES
POUR LES AMPLITUDES DE DIFFUSION
D'UN PHOTON PAR UN ATOME**

Dans le chapitre II, nous avons passé en revue plusieurs processus de diffusion de photons par des particules chargées ou des atomes. Pour décrire ces processus, nous avons utilisé des amplitudes de diffusion calculées à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbations. Comme nous l'avons déjà vu à propos de la diffusion résonnante, une telle approche n'est pas toujours suffisante, dans la mesure où les diagrammes faisant intervenir l'état intermédiaire résonnant peuvent conduire à des divergences. La resommation de tous ces diagrammes est alors nécessaire pour obtenir une expression finie.

Une approche allant au delà de l'ordre le plus bas est également nécessaire pour tenir compte correctement de l'interaction de l'atome avec le champ électromagnétique quantique dans les états initial et final du processus de diffusion. En effet, même si le photon incident est loin de l'atome, ce dernier interagit avec le champ électromagnétique en émettant et réabsorbant virtuellement des photons. L'interaction atome-champ est donc toujours présente et doit être prise en compte dans la définition même des états asymptotiques de la diffusion.

Ces problèmes peuvent être abordés de différentes façons, en particulier à partir des états stationnaires de collision. Nous allons utiliser ici une autre présentation qui est davantage basée sur l'étude de l'évolution temporelle du système et qui utilise les propriétés de l'opérateur $G(z)$. Dans le paragraphe 1, nous reprenons dans cet esprit le calcul des amplitudes de diffusion et de la matrice S fait dans le complément A_1 à l'ordre 2 pour le compléter par l'établissement du développement de Born de la matrice \mathcal{G} . Nous obtenons également une expression compacte de ce développement utilisant la résolvante et permettant de traiter le cas de la diffusion résonnante. Il apparaît toutefois qu'une telle approche est insuffisante pour traiter le problème de la diffusion d'un champ quantique, et que des états asymptotiques stationnaires doivent être correctement définis. Ce problème est abordé dans le paragraphe 2. Nous établissons enfin au paragraphe 3 une expression exacte de la matrice S pour la diffusion d'un photon par un atome, tenant compte de tous les processus radiatifs, aussi bien dans l'état intermédiaire que dans les états initial et final.

1. Amplitude de transition entre états non perturbés

Dans tout ce paragraphe, nous considérons comme états initial et final de la diffusion des états propres de l'hamiltonien non perturbé H_0 . Pour la diffusion d'un photon, ces états sont

$$|\varphi_i\rangle = |\alpha; \mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (1.a)$$

$$|\varphi_f\rangle = |\alpha'; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle \quad (1.b)$$

et il faut évaluer l'amplitude de transition entre l'état $|\varphi_i\rangle$ et l'état $|\varphi_f\rangle$.

A la limite où le temps d'interaction tend vers l'infini, et si l'on élimine les facteurs de phase évidents provenant de l'évolution non perturbée des états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$, cette amplitude est l'élément S_{fi} de la « matrice S » :

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \langle \varphi_f | S | \varphi_i \rangle = \\ &= \text{Lim}_{T \rightarrow \infty} [\exp(iE_f T/2\hbar) \langle \varphi_f | U(T/2, -T/2) | \varphi_i \rangle \exp(iE_i T/2\hbar)] \end{aligned} \quad (2)$$

Dans (2), $U(t, t')$ représente l'opérateur d'évolution sous l'action de l'hamiltonien total

$$H = H_0 + V \quad (3)$$

incluant l'interaction V .

a) UTILISATION DE LA RÉSOLVANTE

Nous allons calculer explicitement (2) en utilisant des propriétés de la résolvante $G(z)$. D'après l'équation (A.22) prise pour $t > 0$,

$$S_{fi} = \text{Lim}_{T \rightarrow +\infty} \left\{ \exp \frac{iT}{2\hbar} (E_f + E_i) \left(\int_{C_+} dz \frac{e^{-izT/\hbar}}{2i\pi} \langle \varphi_f | G(z) | \varphi_i \rangle \right) \right\} \quad (4)$$

Nous n'allons pas ici remplacer directement $G(z)$ par $1/(z - H)$. En effet, afin d'obtenir une expression ayant une limite bien définie lorsque T tend vers l'infini, il est intéressant de faire apparaître $G_0(z)$ à gauche et à droite de $G(z)$. Les pôles correspondants situés en E_i et E_f donneront alors naissance à des termes oscillants compensant ceux qui sont à l'extérieur de l'intégrale. Pour ce faire, nous utilisons l'équation (A.23) reliant G à G_0 sous la forme

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z), \quad (5.a)$$

puis sous la forme

$$G(z) = G_0(z) + G(z) V G_0(z). \quad (5.b)$$

Le remplacement de $G(z)$ par l'expression (5.b) au second membre de (5.a) donne alors :

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) + G_0(z) V G(z) V G_0(z) \quad (6)$$

et par suite

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | G(z) | \varphi_i \rangle &= \frac{\delta_{if}}{z - E_i} + \\ &+ \frac{1}{(z - E_i)(z - E_f)} \{ V_{fi} + \langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle \} \end{aligned} \quad (7)$$

Nous supposons pour le moment que l'élément de matrice $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$ n'a pas de pôle réel dans la région $z = E_i$ ou E_f . Par contre, nous n'excluons pas l'existence d'une coupure correspondant à la partie continue du spectre de H . Des pôles complexes peuvent bien sûr exister dans le second feuillet de Riemann.

Il faut maintenant porter l'expression (7) dans (4) et calculer l'intégrale par la méthode des résidus en fermant le contour vers $z = -i\infty$ suivant le trajet indiqué sur la figure 2 du complément A_{III} . Considérons d'abord la contribution des singularités de $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$. Les pôles complexes du deuxième feuillet de Riemann donneront des termes du type

$$\exp \frac{iT}{\hbar} \left\{ \frac{E_f + E_i}{2} - \left(E_b + \hbar \Delta_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \right) \right\} \quad (8)$$

qui tendent vers zéro rapidement lorsque T tend vers l'infini. De même, comme nous l'avons vu dans le complément A_{III} , la contribution du lacet tend également vers zéro quand $T \rightarrow \infty$. Enfin, d'éventuels pôles discrets E_α , éloignés de E_i et E_f donneraient des contributions du type :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(E_\alpha - E_i)(E_\alpha - E_f)} \text{Res} \{ \langle \varphi_f | V G(E_\alpha) V | \varphi_i \rangle \} \times \\ &\times \exp \frac{iT}{\hbar} \left(\frac{E_f + E_i}{2} - E_\alpha \right) \end{aligned} \quad (9)$$

D'après les hypothèses faites sur les pôles E_α , les dénominateurs sont grands, et le coefficient de l'exponentiel est donc petit. De plus, lorsque T tend vers l'infini, l'exponentielle devient une fonction de E_i et E_f oscillant très rapidement. Au sens des distributions, une telle fonction est nulle, car intégrée sur E_i ou E_f , après multiplication par une fonction lentement variable de ces paramètres, elle donnera une

intégrale d'autant plus petite que T est grand. En définitive, les singularités de $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$ ne contribuent pas à l'intégrale de (4).

b) MATRICE DE TRANSITION

Le calcul de S_{fi} se réduit donc à celui de la contribution des pôles de (7) situés $z = E_i$ et $z = E_f$. Notons $T_{fi}(E)$ le coefficient de $1/(z - E_i)(z - E_f)$ dans (7), pris pour $z = E + i\eta$:

$$T_{fi}(E) = \langle \varphi_f | V + V G(E + i\eta) V | \varphi_i \rangle \quad (10)$$

La contribution à (4) des pôles en E_i et E_f de (7) peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \exp \frac{iT}{2\hbar} (E_f + E_i) \times \right. \\ &\quad \times \left[\delta_{if} e^{-i \frac{E_i T}{\hbar}} + T_{fi}(E_i) \frac{e^{-i \frac{E_i T}{\hbar}}}{E_i - E_f} + T_{fi}(E_f) \frac{e^{-i \frac{E_f T}{\hbar}}}{E_f - E_i} \right] \} \\ &= \delta_{fi} + \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \frac{T_{fi}(E_i) - T_{fi}(E_f)}{E_i - E_f} \cos(E_f - E_i) \frac{T}{2\hbar} - \right. \\ &\quad \left. - i [T_{fi}(E_i) + T_{fi}(E_f)] \frac{\sin(E_f - E_i) \frac{T}{2\hbar}}{E_f - E_i} \right\} \quad (11) \end{aligned}$$

Le coefficient du cosinus est fini pour $E_i = E_f$. Lorsque T tend vers l'infini, le cosinus est une fonction rapidement oscillante de $E_i - E_f$, d'amplitude finie. Nous avons déjà vu qu'une telle fonction est nulle au sens des distributions. Dans le dernier terme, on reconnaît la fonction $\pi \delta^{(T)}(E_f - E_i)$, de sorte qu'à la limite $T \rightarrow \infty$, $E_i = E_f$ et S_{fi} se réduit à l'expression :

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2i\pi \delta(E_f - E_i) \mathcal{G}_{fi} \quad (12)$$

où la matrice de transition \mathcal{G}_{fi} est donnée par l'expression (10) prise pour $E = E_i$:

$$\mathcal{G}_{fi} = \langle \varphi_f | V + V G(E_i + i\eta) V | \varphi_i \rangle \quad (13)$$

Nous avons établi ainsi de façon générale les formules (B.13) et (B.15) du chapitre I, sous réserve des hypothèses de régularité faites à propos de $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$. Si l'on remplace dans (13), $G(E_i + i\eta)$ par son développement (A.24) en puissances de V , on obtient le développement de Born de \mathcal{G}_{fi} , dont les premiers termes sont bien ceux que nous avons déjà rencontrés (formule (29) du complément A_I).

c) APPLICATION À LA DIFFUSION RÉSONNANTE

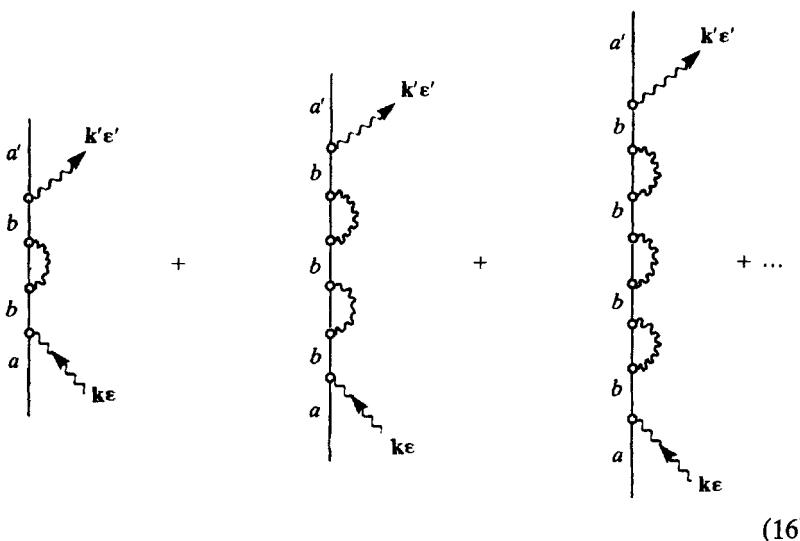
Pour cette application, l'hamiltonien H_0 est $H_0 = H_P + H_R$ et le couplage V est l'hamiltonien d'interaction $H_I = H_{I1} + H_{I2} + H_{I1}^*$ (voir § 3-b de l'appendice). Nous avons vu dans le chapitre II (§ C-3) que trois états jouent un rôle privilégié dans la diffusion résonnante : l'état initial $|a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ couplé par l'interaction H_I à l'état excité résonnant $|b; 0\rangle$, ce dernier étant lui-même couplé au continuum des états finals $|a'; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$ (voir figure 20 du chapitre II). Négligeant les processus non résonnantes concernant les états $|a\rangle$ et $|a'\rangle$, nous essayons ici de tenir compte de toutes les transitions intermédiaires vers l'état résonnant $|b; 0\rangle$ entre l'absorption du photon initial et l'émission du photon final. Pour une transition dipolaire électrique, ces deux derniers processus ne peuvent être réalisés de façon résonnante que par H_{I1} , et la matrice \mathcal{G} s'écrit à cette approximation

$$\mathcal{G}_{fi}^{res} = \langle a'; \mathbf{k}'\epsilon' | H_{I1} | b; 0 \rangle \langle b; 0 | G(E_a + \hbar\omega + i\eta) | b; 0 \rangle \langle b; 0 | H_{I1} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle \quad (14)$$

Nous avons vu au chapitre II que l'approximation consistant à remplacer G par G_0 dans l'état intermédiaire revient à ne tenir compte que du processus (15),



et conduit à une divergence de \mathcal{G}_{fi}^{res} . Une approximation meilleure consiste à remplacer dans (14) $\langle b; 0 | G(E_a + \hbar\omega + i\eta) | b; 0 \rangle$ par l'expression (C.17). Ceci revient à resommer tous les processus d'ordre supérieur représentés en (16) :



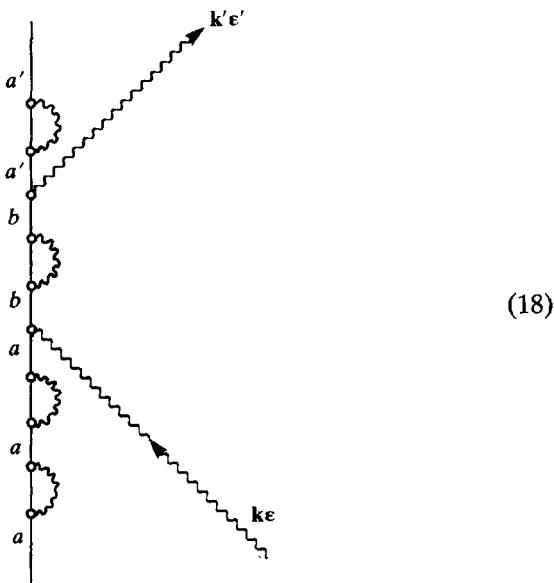
L'expression de \mathcal{G}_{fi}^{res} devient alors

$$\mathcal{G}_{fi}^{res} = \frac{\langle a'; k'\epsilon' | H_{I1} | b; 0 \rangle \langle b; 0 | H_{II} | a; k\epsilon \rangle}{E_a + \hbar\omega - (E_b + \hbar\Delta_b) + i\frac{\hbar}{2}\Gamma_b} \quad (17)$$

et coïncide, au déplacement radiatif de l'état b près, avec l'expression (C.5) du chapitre II. L'utilisation de la résolvante nous a ainsi permis d'établir une expression non perturbative de l'amplitude de diffusion à résonance.

d) INSUFFISANCES DE L'APPROCHE PRÉCÉDENTE

Dans le calcul exposé ci-dessus, seuls les processus radiatifs d'ordre supérieur affectant l'état intermédiaire ont été pris en compte. Les processus analogues affectant l'état initial ou l'état final ont été ignorés. Une conséquence de cette approximation est visible sur (17) : l'énergie de l'état a n'est pas corrigée de $\hbar\Delta_a$. Partant de l'expression exacte de $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$, on pourrait considérer le développement complet de $G(z)$ et resommer également les contributions des processus dans lesquels le premier et le dernier évènement ne sont pas l'absorption du photon initial et l'émission du photon final. Un tel processus est décrit par exemple en (18).



Ce faisant, on prendrait en compte dans l'expression de \mathcal{T}_{fi} les processus qui corrigent l'énergie des états initial et final, mais la démarche qui conduit de l'expression (7) à l'expression (13) n'est alors plus justifiée. Il apparaît en effet dans $\langle \varphi_f | V G(z)V | \varphi_i \rangle$ des pôles réels aux énergies $E_a + \hbar \Delta_a + \hbar \omega$ et $E_{a'} + \hbar \Delta_{a'} + \hbar \omega'$, voisines de E_i et E_f . Il faut donc reprendre entièrement l'établissement de l'expression de S_{fi} .

La difficulté que nous rencontrons ici trouve son origine dans le fait que les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ considérés ne sont pas asymptotiquement stationnaires. Dans les collisions habituelles, l'interaction V entre les particules peut être négligée dans l'état initial et dans l'état final. Les états propres de H_0 sont alors adéquats pour décrire ces états, dans la mesure où il est possible de bâtir avec ces états des paquets d'ondes quasi-monochromatiques, mais d'extension finie, tels que les particules soient éloignées les unes des autres, et que V soit effectivement négligeable. Dans le cas présent, H_I ne décrit pas seulement l'interaction de l'atome avec les photons initial et final, mais aussi l'interaction de l'atome avec le champ transverse dans son ensemble. Or le champ transverse interagit en permanence avec les particules constituant l'atome. Cette interaction est responsable de nombreux effets physiques (interaction magnétique entre particules, effet de retard dans l'interaction électromagnétique, corrections radiatives) et il n'est pas justifié de négliger H_I dans l'état initial ou final. On peut dire en d'autres termes que les états asymptotiques corrects du processus de diffusion contien-

ment non seulement les photons libres $\mathbf{k}\epsilon$ ou $\mathbf{k}'\epsilon'$, mais aussi le « nuage de photons virtuels » qui décrivent le champ transverse au voisinage de l'atome. Nous allons donc reprendre la théorie de la diffusion en introduisant de tels états.

2. Introduction d'états asymptotiques exacts

a) L'ATOME EN L'ABSENCE DE PHOTONS LIBRES

Les états atomiques $|a\rangle$, $|a'\rangle$, $|b\rangle$,... sont des états propres de l'« hamiltonien des particules » H_P donné au chapitre I (formule (C.7.b)). Ils ne sont stationnaires qu'en l'absence de couplage avec le champ transverse. Le vrai hamiltonien du système des particules constituant l'atome, interagissant via le champ électromagnétique, est l'hamiltonien total

$$\begin{aligned} H &= H_P + H_R + H_I \\ &= H_0 + H_I \end{aligned} \quad (19)$$

Le seul état stationnaire stable de l'atome est alors l'état fondamental de H , que nous appellerons $|\psi_a\rangle$, d'énergie \tilde{E}_a

$$H|\psi_a\rangle = \tilde{E}_a|\psi_a\rangle \quad (20)$$

L'état $|\psi_a\rangle$ représente l'atome dans son état fondamental en l'absence de photon libre, mais accompagné du champ transverse qui lui est associé, ainsi que des fluctuations du vide du champ dans tout l'espace. L'écart entre \tilde{E}_a et E_a représente le déplacement radiatif de l'état fondamental. Nous supposerons que l'état $|\psi_a\rangle$ est normé. Le reste du spectre de H est un continuum s'étendant de \tilde{E}_a à $+\infty$.

Remarques

- (i) L'état fondamental de H peut être dégénéré, et comprendre plusieurs sous-niveaux $|\psi_a\rangle$, $|\psi_{a'}\rangle$... Certains niveaux proches de l'état fondamental peuvent avoir une durée de vie radiative assez longue pour pouvoir être considérés comme stables à une certaine approximation. Le spectre de H est alors constitué de plusieurs continuums commençant aux énergies \tilde{E}_a , $\tilde{E}_{a'}$...
- (ii) L'expression de $|\psi_a\rangle$ peut être obtenue sous forme d'un développement de type Wigner-Brillouin. Appelons P le projecteur sur le sous-espace propre de H_0 dans lequel est choisie l'approximation d'ordre zéro $|\psi_a^0\rangle = |a;0\rangle$ de $|\psi_a\rangle$ (et éventuellement celle des autres sous-niveaux $|\psi_a\rangle$ de l'état fondamental). Les vecteurs d'état $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_a^0\rangle$ étant supposés normés, on note \sqrt{Z} la constante représentant la composante de $|\psi_a\rangle$ sur $|\psi_a^0\rangle$. Décomposons alors $|\psi_a\rangle$ sur les deux sous-espaces définis

par P et $Q = 1 - P$:

$$|\psi_a\rangle = \sqrt{Z} |\psi_a^0\rangle + Q |\psi_a\rangle \quad (21)$$

L'expression de $Q |\psi_a\rangle$ est obtenue de la façon suivante : multiplions (20) par Q à gauche et introduisons $1 = P + Q$ entre H et $|\psi_a\rangle$. Comme $P |\psi_a\rangle$ est égal par définition à $\sqrt{Z} |\psi_a^0\rangle$, et que $PH_0Q = 0$, il vient :

$$\begin{aligned} Q |\psi_a\rangle &= \frac{1}{\tilde{E}_a - QHQ} Q H_I P |\psi_a^0\rangle \sqrt{Z} \\ &= \frac{1}{\tilde{E}_a - QH_0Q - QH_IQ} Q H_I P |\psi_a^0\rangle \sqrt{Z} \end{aligned} \quad (22)$$

Le développement de la fraction de (22) en puissances de H_I et son report dans (21) donne le développement de Wigner-Brillouin de $|\psi_a\rangle$. La constante Z est déterminée par la normalisation de $|\psi_a\rangle$.

L'état $|\psi_a\rangle$ n'est pas un état à zéro photon. Pour le voir, il suffit de vérifier que l'opérateur $a_\epsilon(\mathbf{k})$ ne donne pas zéro lorsqu'il agit sur $|\psi_a\rangle$ (voir le calcul ci-dessous). Les photons présents dans l'état $|\psi_a\rangle$ sont en fait les photons « virtuels » qui accompagnent l'atome dans son état fondamental et qui décrivent quantiquement le champ transverse qui lui est associé.

Calculons de façon plus précise $a_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle$. La relation

$$H a_\epsilon(\mathbf{k}) - a_\epsilon(\mathbf{k}) H = -\hbar\omega a_\epsilon(\mathbf{k}) + [H_I, a_\epsilon(\mathbf{k})] \quad (23)$$

établie à partir de $[H_0, a_\epsilon(\mathbf{k})] = -\hbar\omega a_\epsilon(\mathbf{k})$, conduit à

$$(H - \tilde{E}_a + \hbar\omega) a_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle = [H_I, a_\epsilon(\mathbf{k})] |\psi_a\rangle \quad (24)$$

Notons

$$V_\epsilon^+(\mathbf{k}) = [a_\epsilon(\mathbf{k}), H_I] = \frac{\partial}{\partial a_\epsilon^+(\mathbf{k})} H_I \quad (25.a)$$

$$= -\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega(2\pi)^3}} \sum_\alpha \epsilon_\alpha (\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)) \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \exp[-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\alpha] \quad (25.b)$$

Il vient finalement

$$a_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle = -\frac{1}{\hbar\omega + H - \tilde{E}_a} V_\epsilon^+(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle \quad (26)$$

Le spectre de H est borné inférieurement par \tilde{E}_a , de sorte que le dénominateur vaut au moins $\hbar\omega$, tandis que le numérateur est du premier ordre en H_I . Ainsi, $a_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle$ est d'ordre 1 vis à vis du couplage entre les particules et le champ transverse.

b) L'ATOME EN PRÉSENCE D'UN PHOTON LIBRE

Considérons l'état obtenu en créant un photon $\mathbf{k}\epsilon$ en présence de l'état fondamental de l'atome.

$$|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle = a_\epsilon^+(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle \quad (27)$$

Ces états $|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ ne sont pas exactement états propres de H comme l'était l'état $|\psi_a\rangle$. En effet, on a :

$$\begin{aligned} H|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle &= H a_\epsilon^+(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle \\ &= [H, a_\epsilon^+(\mathbf{k})] |\psi_a\rangle + a_\epsilon^+(\mathbf{k}) H |\psi_a\rangle \end{aligned} \quad (28)$$

Le fait que $|\psi_a\rangle$ soit état propre de H permet d'écrire, compte tenu de la relation de commutation $[H_0, a_\epsilon^+(\mathbf{k})] = \hbar\omega a_\epsilon^+(\mathbf{k})$ et de (25)

$$\begin{aligned} H|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle &= (\tilde{E}_a + \hbar\omega) |\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle + [H_I, a_\epsilon^+(\mathbf{k})] |\psi_a\rangle \\ &= (\tilde{E}_a + \hbar\omega) |\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle + V_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

Si l'on pouvait négliger le second terme du deuxième membre de (29), $|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ serait état propre de H de valeur propre $\tilde{E}_a + \hbar\omega$. Nous allons montrer qu'il est possible de faire une telle approximation pour des paquets d'ondes construits à partir des $|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ et pour lesquels le photon est localisé loin de l'atome. De façon plus précise, considérons le vecteur d'état $|\phi(t)\rangle$ formé en combinant des états $|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ avec une amplitude $g_\epsilon(\mathbf{k})$ et un facteur d'évolution temporelle $\exp[-i(\tilde{E}_a + \hbar\omega)t/\hbar]$:

$$|\phi(t)\rangle = \int d^3k \sum_\epsilon g_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle \exp[-(i\tilde{E}_a + \hbar\omega)t/\hbar] \quad (30)$$

L'utilisation de (29) conduit alors sans difficulté à

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\phi(t)\rangle &= \\ &= - \int d^3k \sum_\epsilon g_\epsilon(\mathbf{k}) e^{-i\omega t} V_\epsilon(\mathbf{k}) |\psi_a\rangle \exp(-i\tilde{E}_a t/\hbar) \end{aligned} \quad (31)$$

Appelons $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t)$ le paquet d'ondes planes transverses construit à partir de $g_\epsilon(\mathbf{k}) / \sqrt{\omega}$

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon g_\epsilon(\mathbf{k}) \epsilon \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (32)$$

L'équation (31) s'écrit alors, compte tenu de (25) :

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) |\phi(t)\rangle = \sum_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0}} q_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{g}(\mathbf{r}_\alpha, t) |\psi_a\rangle \exp(-i\tilde{E}_a t/\hbar) \quad (33)$$

où $\mathbf{v}_\alpha = [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]/m_\alpha$ est l'opérateur vitesse de la particule α . Supposons pour fixer les idées que la fonction $g_\epsilon(\mathbf{k})$ soit réelle, piquée autour du mode $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$, et de largeur Δk . La fonction $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t=0)$ est alors centrée au voisinage de l'origine, la dimension du paquet d'ondes étant $1/\Delta k$. L'évolution temporelle du paquet d'ondes est une propagation à la vitesse c dans la direction \mathbf{k}_0 . Au bout d'un temps $|t| \gg 1/c\Delta k$, le paquet d'ondes a donc quitté l'origine et $\mathbf{g}(0, t) = 0$. Ainsi, lorsque $|t| \rightarrow \infty$, et dans la mesure où dans l'état $|\psi_a\rangle$ les coordonnées \mathbf{r}_α des particules sont voisines de 0, on a :

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}_\alpha, t) |\psi_a\rangle \approx 0 \quad (34)$$

et par suite

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) |\phi(t)\rangle \approx 0 \quad (35)$$

Le vecteur d'état (30) est donc solution de l'équation de Schrödinger pour $|t| \rightarrow \infty$. La limite $|t| \rightarrow \infty$ signifie simplement que le paquet d'ondes (32) est sorti de la région où se situe l'atome. Passons maintenant à la limite où Δk tend vers zéro. $|\phi(t)\rangle$ comprend alors essentiellement l'état $|\psi_a; \mathbf{k}_0 \epsilon_0\rangle$ évoluant avec l'énergie $\tilde{E}_a + \hbar\omega_0$ et le paquet d'ondes (32) a une extension spatiale L_1 qui tend vers l'infini. Cependant, pour des temps supérieurs à c/L_1 , l'état $|\phi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger. Ainsi, en donnant à cette expression le sens que nous venons de définir par le double passage à la limite $\Delta k \rightarrow 0$ et $t \gg 1/c\Delta k$, on peut considérer l'état $|\psi_a; \mathbf{k}_0 \epsilon_0\rangle$ comme asymptotiquement stationnaire, avec l'énergie $\tilde{E}_a + \hbar\omega_0$. Un tel état décrit pour $t \rightarrow -\infty$, un photon quasi-monochromatique $\mathbf{k}_0 \epsilon_0$, incident sur l'atome, et pour $t \rightarrow +\infty$, ce même photon s'éloignant à l'infini. Les états $|\psi_a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ sont donc tout à fait adaptés pour décrire l'état initial, ou l'état final d'un processus de diffusion d'un photon par un atome.

3. Amplitude de transition entre états asymptotiques exacts

a) NOUVELLE DÉFINITION DE LA MATRICE S

Nous venons de voir, qu'à la limite $|t| \rightarrow \infty$, l'évolution temporelle des états asymptotiques est donnée par de simples exponentielles oscillantes correspondant aux énergies

$$\tilde{E}_{a;\mathbf{k}\epsilon} = \tilde{E}_a + \hbar\omega \quad (36)$$

dans lesquelles figure l'énergie exacte \tilde{E}_a de l'état $|\psi_a\rangle$. La généralisa-

tion de la définition (2) de la matrice S aux états asymptotiques exacts introduits plus haut est donc :

$$\tilde{S}_{fi} = \lim_{T \rightarrow \infty} [\exp(i\tilde{E}_f T/2\hbar) \langle \tilde{\varphi}_f | U(T/2, -T/2) | \tilde{\varphi}_i \rangle \exp(i\tilde{E}_i T/2\hbar)] \quad (37)$$

où

$$\tilde{E}_i = \tilde{E}_{a;\mathbf{k}\epsilon} = \tilde{E}_a + \hbar\omega \quad (38.a)$$

$$\tilde{E}_f = \tilde{E}_{a';\mathbf{k}'\epsilon'} = \tilde{E}_{a'} + \hbar\omega' \quad (38.b)$$

$$|\tilde{\varphi}_i\rangle = |\psi_a;\mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (38.c)$$

$$|\tilde{\varphi}_f\rangle = |\psi_{a'};\mathbf{k}'\epsilon'\rangle \quad (38.d)$$

Comme dans le paragraphe 1, le calcul de l'élément de matrice de U se ramène à celui de $G(z)$ entre $|\tilde{\varphi}_i\rangle$ et $|\tilde{\varphi}_f\rangle$. Compte tenu de (38.c), (38.d) et (27), cet élément de matrice s'écrit :

$$\langle \tilde{\varphi}_f | G(z) | \tilde{\varphi}_i \rangle = \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') G(z) a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle, \quad (39)$$

La formule (4) doit donc être remplacée par

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{fi} = \lim_{T \rightarrow \infty} & \left\{ \exp \frac{iT}{2\hbar} (\tilde{E}_f + \tilde{E}_i) \times \right. \\ & \left. \times \left[\int_{c_+} dz \frac{e^{-izT/\hbar}}{2i\pi} \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') G(z) a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \right] \right\} \end{aligned} \quad (40)$$

Pour calculer l'élément de matrice figurant dans (40), il est commode de faire passer $G(z)$ à gauche de $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}')$ ou à droite de $a_{\epsilon}^+(\mathbf{k})$, puisque les états $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_{a'}\rangle$ sont états propres de l'opérateur H figurant dans $G(z)$. Partons pour cela du commutateur

$$[a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}), z - H] = \hbar\omega a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) - [a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}), H_L] \quad (41)$$

qui donne, compte tenu de (25)

$$a_{\epsilon}^+(\mathbf{k})(z - \hbar\omega - H) = (z - H) a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) + V_{\epsilon}(\mathbf{k}) \quad (42)$$

Il suffit alors de multiplier (42), à gauche par $G(z)$, à droite par $G(z - \hbar\omega)$, pour obtenir

$$G(z) a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) = a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) G(z - \hbar\omega) + G(z) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) G(z - \hbar\omega) \quad (43)$$

Multiplions enfin (43) à gauche par $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}')$. Il apparaît au second membre $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') G(z)$ que l'on peut à nouveau transformer en utilisant la

relation adjointe de (43) (z étant remplacé par z^* et $\mathbf{k}\epsilon$ par $\mathbf{k}'\epsilon'$)

$$a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') G(z) = G(z - \hbar\omega') a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') + G(z - \hbar\omega') V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(z)$$
(44)

Nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') G(z) a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) &= a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) G(z - \hbar\omega) + \\ &\quad + G(z - \hbar\omega') a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') V_{\epsilon}(\mathbf{k}) G(z - \hbar\omega) \\ &\quad + G(z - \hbar\omega') V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(z) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) G(z - \hbar\omega) \end{aligned}$$
(45)

et par suite, puisque $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_{a'}\rangle$ sont états propres de H de valeurs propres \tilde{E}_a et $\tilde{E}_{a'}$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\varphi}_f | G(z) | \tilde{\varphi}_i \rangle &= \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \frac{1}{z - \tilde{E}_a - \hbar\omega} + \\ &\quad + \frac{1}{z - \tilde{E}_{a'} - \hbar\omega'} \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \frac{1}{z - \tilde{E}_a - \hbar\omega} + \\ &\quad + \frac{1}{z - \tilde{E}_{a'} - \hbar\omega'} \langle \psi_{a'} | V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(z) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \frac{1}{z - \tilde{E}_a - \hbar\omega} \end{aligned}$$
(46)

Dans le premier terme de (46), $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}')$ peut être amené à droite du produit d'opérateurs par une relation de commutation :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\varphi}_f | G(z) | \tilde{\varphi}_i \rangle &= \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\delta_{aa'}}{z - \tilde{E}_i} + \\ &\quad + \frac{1}{(z - \tilde{E}_i)} \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon}^+(\mathbf{k}) a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') | \psi_a \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{(z - \tilde{E}_i)(z - \tilde{E}_f)} \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') V_{\epsilon}(\mathbf{k}) + V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(z) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \end{aligned}$$
(47)

Au deuxième terme près, dont nous montrerons plus loin que sa contribution à (40) est négligeable, l'expression (47) ressemble beaucoup à (7). Nous pouvons utiliser cette analogie pour appliquer à (47) la démarche des paragraphes 1-a, 1-b et 1-c, après avoir montré que l'hypothèse initiale faite après l'expression (7) est bien vérifiée ici, à savoir que $\langle \psi_{a'} | V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(z) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle$ n'a pas de pôles réels dans la région $z = \tilde{E}_i$ ou \tilde{E}_f .

Pour cela, rappelons (voir le complément A_{III}) que si $|u\rangle$ est un vecteur d'état normé, $\langle u|G(z)|u\rangle$ admet des pôles pour les valeurs propres discrètes de H et une coupure sur l'axe réel correspondant au spectre continu. Cette propriété se généralise aisément aux éléments de matrice de $G(z)$ entre deux états différents de norme finie (voir la remarque du paragraphe 1 du complément A_{III}). Vérifions d'abord que $V_\epsilon(\mathbf{k})|\psi_a\rangle$ est bien de norme finie. En utilisant (25.b) et l'expression de la vitesse \mathbf{v}_α de la particule α , on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \psi_a | V_\epsilon^+(\mathbf{k}) V_\epsilon(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle &= \\ &= \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} q_\alpha q_{\alpha'} \langle \psi_a | \epsilon \cdot \mathbf{v}_{\alpha'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_{\alpha'})} \epsilon \cdot \mathbf{v}_\alpha | \psi_a \rangle \quad (48) \end{aligned}$$

Le second membre est la moyenne, dans l'état fondamental du système, d'observables qui sont à l'évidence finies (la vitesse des particules est bornée), de sorte que le carré de la norme de $V_\epsilon(\mathbf{k})|\psi_a\rangle$ est fini. Il en est de même pour $V_\epsilon(\mathbf{k}')|\psi_{a'}\rangle$. Il résulte que $\langle \psi_{a'} | V_\epsilon(\mathbf{k}') G(z) V_\epsilon(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle$ n'a pas d'autres pôles discrets que \tilde{E}_a et $\tilde{E}_{a'}$, qui sont éloignés de $\tilde{E}_i = \tilde{E}_a + \hbar\omega$ et $\tilde{E}_f = \tilde{E}_{a'} + \hbar\omega'$.

Ainsi, le même raisonnement que celui fait à la fin du paragraphe 1-a permet de négliger les contributions des singularités de $G(z)$ à l'intégrale de contour (40), à la limite $T \rightarrow \infty$. Les seules contributions non nulles proviennent des pôles en \tilde{E}_i et \tilde{E}_f de (47). Un calcul analogue à celui du paragraphe 1-b permet alors de généraliser (pour les premier et troisième termes de (47)) les résultats (12) et (13) sous la forme

$$\tilde{S}_{fi} = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{aa'} - 2i\pi \delta^{(D)}(\tilde{E}_i - \tilde{E}_f) \tilde{\mathcal{C}}_{fi} \quad (49.a)$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_{fi} &= \langle \psi_{a'} | a_\epsilon(\mathbf{k}') V_\epsilon(\mathbf{k}) + V_\epsilon^+(\mathbf{k}') G(\tilde{E}_i + i\eta) V_\epsilon(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \\ &\quad (49.b) \end{aligned}$$

Calculons enfin la contribution c_2 du second terme de (47) à (40). Une intégration par la méthode des résidus donne immédiatement :

$$c_2 = \lim_{T \rightarrow \infty} \left(\exp \frac{iT}{2\hbar} (\tilde{E}_f - \tilde{E}_i) \right) \times \langle \psi_{a'} | a_\epsilon^+(\mathbf{k}) a_\epsilon(\mathbf{k}') | \psi_a \rangle \quad (50)$$

Lorsque T tend vers l'infini, c_2 devient une fonction rapidement oscillante de \tilde{E}_i et \tilde{E}_f . Son amplitude est finie, et même petite dans la mesure où $a_\epsilon(\mathbf{k}')|\psi_a\rangle$ est d'ordre 1 en H_I (voir fin du paragraphe 2-a). Au sens des distributions, c_2 tend donc vers zéro.

Remarque

Revenons sur la comparaison entre (7) et (47). La démonstration faite plus haut ne peut pas s'appliquer à $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$ car $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ sont des états du spectre continu, qui ne sont pas de norme finie. En fait nous avons montré de façon perturbative au paragraphe 1-d que $\langle \varphi_f | V G(z) V | \varphi_i \rangle$ a des pôles en $\tilde{E}_a + \hbar\omega$ et $\tilde{E}_{a'} + \hbar\omega'$.

b) NOUVELLE EXPRESSION DE LA MATRICE DE TRANSITION. DISCUSSION PHYSIQUE

L'expression (49.b) de \mathcal{T}_{fi} peut être encore transformée et mise sous une forme très voisine de celle de l'expression perturbative décrivant, au second ordre en q , le même processus de diffusion entre états découpés $|a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ et $|a'; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$ (formule (C.1) du chapitre II).

Pour cela, nous allons faire passer $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}')$ à droite de $V_{\epsilon}(\mathbf{k})$ dans le premier terme de (49.b) et utiliser le résultat (26) obtenu plus haut pour $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') |\psi_a\rangle$. Nous noterons $W_{\epsilon'\epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ le commutateur de $a_{\epsilon'}(\mathbf{k}')$ et $V_{\epsilon}(\mathbf{k})$, qui vaut d'après (25) :

$$\begin{aligned} W_{\epsilon'\epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= [a_{\epsilon'}(\mathbf{k}'), V_{\epsilon}(\mathbf{k})] \\ &= [a_{\epsilon'}(\mathbf{k}'), [H_I, a_{\epsilon}^+(\mathbf{k})]] \\ &= \frac{\hbar}{2\epsilon_0(2\pi)^3 \sqrt{\omega\omega'}} \sum_{\alpha} \epsilon \cdot \epsilon' \frac{q_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{\alpha}] \end{aligned} \quad (51)$$

Il est possible alors d'écrire le premier terme de (49.b) sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \psi_{a'} | a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle &= \langle \psi_{a'} | W_{\epsilon'\epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + V_{\epsilon}(\mathbf{k}) a_{\epsilon'}(\mathbf{k}') | \psi_a \rangle \\ &= \langle \psi_{a'} | W_{\epsilon'\epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + V_{\epsilon}(\mathbf{k}) G(\tilde{E}_a - \hbar\omega) V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') | \psi_a \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

où nous avons utilisé (26) pour passer de la première à la seconde ligne. Finalement, la nouvelle matrice de transition $\tilde{\mathcal{T}}_{fi}$ peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{T}}_{fi} &= \langle \psi_{a'} | W_{\epsilon'\epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + V_{\epsilon}(\mathbf{k}) G(\tilde{E}_a - \hbar\omega) V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') + \\ &\quad + V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G(\tilde{E}_a + \hbar\omega + i\eta) V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | \psi_a \rangle \end{aligned} \quad (53)$$

Pour faciliter la comparaison entre les expressions exacte et perturbative de $\tilde{\mathcal{T}}_{fi}$, il est commode de réécrire la formule (C.1) du chapitre II en y faisant apparaître les opérateurs $V_{\epsilon}(\mathbf{k})$ et $V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}')$ utilisés ici. Il suffit pour cela de noter que

$$\begin{aligned} \langle b; 0 | H_{I1} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle &= \langle b; 0 | H_I | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle \\ &= \langle b; 0 | [H_I, a_{\epsilon}^+(\mathbf{k})] | a; 0 \rangle \\ &= \langle b; 0 | V_{\epsilon}(\mathbf{k}) | a; 0 \rangle \end{aligned} \quad (54)$$

et

$$\begin{aligned} \langle a'; \mathbf{k}' \epsilon' | H_{I2} | a; \mathbf{k} \epsilon \rangle &= \langle a'; 0 | a_\epsilon(\mathbf{k}') H_I a_\epsilon^+(\mathbf{k}) | a; 0 \rangle = \\ &= \langle a'; 0 | [a_\epsilon(\mathbf{k}'), [H_I, a_\epsilon^+(\mathbf{k})]] + [H_I, a_\epsilon^+(\mathbf{k})] a_\epsilon(\mathbf{k}') + \\ &\quad + a_\epsilon(\mathbf{k}') a_\epsilon^+(\mathbf{k}) H_I | a; 0 \rangle \\ &= \langle a'; 0 | W_{\epsilon' \epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) | a; 0 \rangle + \delta_{\epsilon \epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle a'; 0 | H_I | a; 0 \rangle \end{aligned} \quad (55)$$

Pour $\mathbf{k} \epsilon \neq \mathbf{k}' \epsilon'$, le second membre de (55) se réduit au premier terme et la formule (C.1) du chapitre II s'écrit sous une forme

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{fi} &= \mathcal{G}_{fi}^{(\gamma)} + \mathcal{G}_{fi}^{(\beta)} + \mathcal{G}_{fi}^{(\alpha)} = \\ &= \langle a'; 0 | W_{\epsilon' \epsilon}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + V_\epsilon(\mathbf{k}) G_0(E_a - \hbar\omega) V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') + \\ &\quad + V_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') G_0(E_a + \hbar\omega + i\eta) V_\epsilon(\mathbf{k}) | a; 0 \rangle \end{aligned} \quad (56)$$

qui rappelle beaucoup celle de l'expression exacte (53).

La comparaison de (53) et (56) montre clairement que, pour passer de l'expression approchée à l'expression exacte, il faut remplacer $|a; 0\rangle$ par $|\psi_a\rangle$, E_a par \tilde{E}_a et G_0 par G . Ainsi, les quantités relatives à l'état fondamental « nu » sont remplacées par celles relatives à l'état « habillé » par le nuage de photons transverses et le propagateur libre G_0 est remplacé par le propagateur perturbé G .

Une analyse plus complète de l'expression (53) dépasse le cadre de ce complément. On peut néanmoins suggérer les idées suivantes : une première approximation du propagateur complet de l'atome est celui d'un atome « nu » dans lequel les électrons ont des masses renormalisées, et l'interaction avec le noyau est modifiée à courte distance. Ainsi, l'utilisation de la formule du second ordre (56), avec des paramètres renormalisés et des énergies complexes pour les états excités, constitue en fait une excellente approximation de (53). Ce résultat, en fait très général, peut être établi dans le cadre de la théorie de la renormalisation. Il justifie la pratique courante dans tous les problèmes d'optique quantique et d'électrodynamique à basse énergie consistant à ignorer les corrections radiatives, et à utiliser d'emblée dans les formules des paramètres physiques renormalisés.

RÉFÉRENCES

Pour la théorie standard des collisions, voir Goldberger and Watson. Pour les applications à la théorie des champs, ce complément s'est inspiré de G.C. Wick, Rev. Mod. Phys. 27, 339 (1955), et Kroll.

COMPLÉMENT C_{III}

**ÉTAT DISCRET COUPLE
À UN CONTINUUM DE LARGEUR FINIE**

**TRANSITION ENTRE LA DÉCROISSANCE EXPONENTIELLE
DE WEISSKOPF-WIGNER ET L'OSCILLATION DE RABI**

1. Introduction - Idée générale

Les méthodes de resommation de la série de perturbation, exposées dans la partie B de ce chapitre, permettent de rendre compte de la décroissance exponentielle d'un niveau discret couplé à un continuum. Nous avons également discuté dans le paragraphe C-1-c les conditions de validité d'un tel résultat. Il faut en particulier que la probabilité de transition par unité de temps Γ_b , de l'état discret $|\varphi_b\rangle$ vers le continuum, soit très petite devant un paramètre w_0 caractérisant l'échelle de variation avec E d'une fonction $\Gamma_b(E)$ qui décrit comment l'état discret $|\varphi_b\rangle$ est couplé aux états du continuum d'énergie E (voir (C.12)). Dans certains cas, lorsque $\Gamma_b(E)$ a la forme d'une courbe en cloche, $\hbar w_0$ est de l'ordre de la largeur à mi-hauteur de cette courbe et peut donc être considéré comme la « *largeur du continuum* ».

Imaginons maintenant que nous puissions augmenter progressivement le couplage V , et donc $\Gamma_b(E)$, sans modifier la largeur $\hbar w_0$ de $\Gamma_b(E)$. Quand Γ_b devient de l'ordre de w_0 , les déviations par rapport à la décroissance exponentielle deviennent de plus en plus importantes. À la limite où Γ_b devient grand devant w_0 , il semble même que la largeur du continuum puisse être négligée en première approximation. Le continuum est alors assimilable à un état discret. On s'attend donc, pour $\Gamma_b \gg w_0$, à ce que le comportement temporel du système se rapproche d'une oscillation de Rabi entre deux niveaux discrets.

Le but de ce complément est de présenter un modèle suffisamment simple d'état discret couplé à un continuum de largeur finie pour qu'on puisse, par des *constructions graphiques*, comprendre comment l'augmentation du couplage V change progressivement le comportement temporel du système (*). Nous commençons (§ 2) par présenter le modèle qui permet d'obtenir une expression *exacte* pour la transformée de Fourier $\mathcal{U}_b(E)$ de l'amplitude $U_b(\tau)$ pour que le système,

(*) C. Cohen-Tannoudji et P. Avan dans « Etats atomiques et moléculaires couplés à un continuum. Atomes et molécules hautement excités », p. 93, éditions du C.N.R.S. (Paris 1977).

préparé à l'instant 0 dans l'état discret $|\varphi_b\rangle$, soit resté dans cet état un instant τ après. Par rapport aux calculs présentés dans le paragraphe C-1 de ce chapitre, nous ne faisons plus l'approximation consistant à remplacer l'expression $R_b(z)$ figurant au dénominateur de (C.4) par une expression approchée $\hat{R}_b(z)$. Le modèle est suffisamment simple pour permettre un calcul *exact* de $R_b(z)$, et donc de $R_b(E \pm i\eta)$. Après avoir discuté les paramètres physiques importants du problème (§ 3), nous indiquons ensuite (§ 4) comment il est possible, pour chaque valeur de E , de construire graphiquement $\mathcal{U}_b(E)$. Nous pouvons alors étudier la forme de $\mathcal{U}_b(E)$ dans divers régimes, couplage faible (§ 5), intermédiaire (§ 6), et fort (§ 7), et comprendre ainsi comme $\mathcal{U}_b(E)$ passe progressivement d'une forme lorentzienne (dont la transformée de Fourier est une exponentielle amortie) à un ensemble de deux fonctions delta (dont la transformée de Fourier est une sinusoïde).

2. Présentation du modèle

a) ÉTATS NON PERTURBÉS

L'hamiltonien non perturbé H_0 est supposé avoir un *seul état propre discret* $|\varphi_b\rangle$, d'énergie E_b , et un *seul continuum* $|E,\beta\rangle$, d'énergie E variant continûment de 0 à $+\infty$ (β est l'ensemble des nombres quantiques autres que E nécessaires pour caractériser les états du continuum).

$$H_0|\varphi_b\rangle = E_b|\varphi_b\rangle \quad (1.a)$$

$$H_0|E,\beta\rangle = E|E,\beta\rangle \quad 0 \leq E < \infty \quad (1.b)$$

b) HYPOTHÈSES SUR LE COUPLAGE

Le couplage est noté λV où λ est un paramètre sans dimensions. Si $\lambda \ll 1$, le couplage est faible ; si $\lambda \gg 1$, le couplage est fort. V est supposé n'avoir d'éléments de matrice non nuls qu'entre l'état discret et le continuum. Ces éléments de matrice sont notés $v(E,\beta)$

$$\langle \varphi_b | V | \varphi_b \rangle = 0 ; \quad \langle E,\beta | V | E',\beta' \rangle = 0 \quad (2.a)$$

$$\langle E,\beta | V | \varphi_b \rangle = v(E,\beta) \quad (2.b)$$

c) CALCUL DE LA RÉSOLVANTE ET DES PROPAGATEURS

L'équation (B.8) du chapitre devient ici

$$G_b(z) = \langle \varphi_b | \frac{1}{z - H_0 - \lambda V} | \varphi_b \rangle = \frac{1}{z - E_b - R_b(z)} \quad (3)$$

où $R_b(z)$ est donné par une expression analogue à (B.4)

$$R_b(z) = \langle \varphi_b | \lambda V | \varphi_b \rangle + \sum_{i \neq b} \frac{\langle \varphi_b | \lambda V | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \lambda V | \varphi_b \rangle}{z - E_i} + \\ + \sum_{i,j \neq b} \frac{\langle \varphi_b | \lambda V | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \lambda V | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \lambda V | \varphi_b \rangle}{(z - E_j)(z - E_i)} + \dots \quad (4)$$

$|\varphi_i\rangle, |\varphi_j\rangle \dots$ étant des états propres de H_0 , autres que $|\varphi_b\rangle$, et d'énergie $E_i, E_j \dots$

Les hypothèses faites plus haut sur H_0 et V permettent alors de simplifier considérablement l'expression (4). Tout d'abord, le premier terme est nul d'après (2.a). Considérons alors le troisième. Comme tous les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$ autres que $|\varphi_b\rangle$ sont nécessairement les états $|E, \beta\rangle$ et $|E', \beta'\rangle$ du continuum (voir § a ci-dessus), l'élément de matrice central du troisième terme de (4) se réduit à $\langle E' \beta' | \lambda V | E, \beta \rangle$ qui est nul d'après (2.a). Un raisonnement analogue permet de montrer que tous les termes d'ordre supérieur en V du développement (4) sont nuls. Il ne reste plus finalement que le terme d'ordre 2 où $|\varphi_i\rangle$ est remplacé par $|E', \beta'\rangle$. $R_b(z)$ s'écrit donc, compte tenu de (2.b) :

$$R_b(z) = \lambda^2 \int \int dE' d\beta' \rho(E', \beta') \frac{|v(E', \beta')|^2}{z - E'} \quad (5)$$

où $\rho(E', \beta')$ est la densité d'états dans le continuum. Ainsi, les hypothèses simplificatrices sur H_0 et V nous ont permis d'obtenir une expression exacte pour $R_b(z)$. De plus, $R_b(z)$ varie simplement en λ^2 .

Les propagateurs retardé et avancé s'écrivent, compte tenu de (A.19) et (3) :

$$G_{b\pm}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} G_b(E \pm i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{E \pm i\eta - E_b - R_b(E \pm i\eta)} \quad (6)$$

Or, d'après (5)

$$R_b(E \pm i\eta) = \lambda^2 \int \int dE' d\beta' \rho(E', \beta') \frac{|v(E', \beta')|^2}{E - E' \pm i\eta} \quad (7)$$

Comme

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (8)$$

l'équation (6) donne

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} R_b(E \pm i\eta) = \hbar \lambda^2 \left[\Delta_b(E) \mp i \frac{\Gamma_b(E)}{2} \right] \quad (9)$$

où

$$\Delta_b(E) = \mathcal{P} \frac{1}{\hbar} \int \int dE' d\beta' \rho(E', \beta') \frac{|v(E', \beta')|^2}{E - E'} \quad (10)$$

$$\Gamma_b(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\beta \rho(E, \beta) |v(E, \beta)|^2 \quad (11)$$

et finalement

$$G_{b\pm}(E) = \text{Lim}_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{1}{E - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E) \pm i \left[\hbar \lambda^2 \frac{\Gamma_b(E)}{2} + \eta \right]} \quad (12)$$

d) TRANSFORMÉE DE FOURIER DE L'AMPLITUDE $U_b(\tau)$

D'après (A.21), la transformée de Fourier $\mathcal{U}_b(E)$ de $U_b(\tau)$ est proportionnelle à $G_{b-}(E) - G_{b+}(E)$. De manière plus précise, les équations (A.21) et (12) donnent

$$U_b(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{U}_b(E) e^{-iE\tau/\hbar} \quad (13.a)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_b(E) &= \frac{1}{2\pi i} [G_{b-}(E) - G_{b+}(E)] = \\ &= \text{Lim}_{\eta \rightarrow 0_+} \frac{\frac{\hbar \lambda^2}{2} \frac{\Gamma_b(E)}{2} + \eta}{[\hbar \lambda^2 \frac{\Gamma_b(E)}{2} + \eta]^2} \quad (13.b) \end{aligned}$$

Finalement, nous avons obtenu pour $U_b(\tau)$ et $\mathcal{U}_b(E)$ des équations tout à fait analogues à (C.20.a) et (C.20.b). Il ne faut pas perdre de vue toutefois que les expressions (10) et (11) de $\Delta_b(E)$ et $\Gamma_b(E)$ sont ici exactes, dans le cadre du modèle simplifié que nous avons choisi, alors que les expressions (C.11) et (C.12) résultent d'un calcul perturbatif de $R_b(E \pm i\eta)$, limité à l'ordre 2 en V (voir (C.5)). Quand V augmente au delà d'une certaine valeur, les expressions (C.11) et (C.12), et donc (C.20), ne sont plus valables, alors que (13.b) demeure toujours exact. Dans le modèle simple que nous avons choisi, l'augmentation du couplage se traduit simplement par une augmentation du facteur λ^2 multipliant $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ dans (13.b), les fonctions $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ gardant toujours la même forme.

Remarque

Nous avons établi les formules (13), qui serviront de base à toute la suite du complément, à partir du formalisme général mis en place dans la

partie A de ce chapitre. Le modèle choisi pour H_0 et V dans ce complément est cependant si simple qu'on peut arriver aux équations (13) de manière plus directe. Développons en effet le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ sur les états $|\varphi_b\rangle$ et $|E,\beta\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = c_b(t)e^{-iE_bt/\hbar}|\varphi_b\rangle + \int \int dEd\beta \rho(E,\beta)c(E,\beta,t)e^{-iEt/\hbar}|E,\beta\rangle \quad (14)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors

$$i\hbar\dot{c}_b(t) = \int \int dEd\beta \lambda v^*(E,\beta)\rho(E,\beta)c(E,\beta,t)e^{i(E_b-E)t/\hbar} \quad (15.a)$$

$$i\hbar\dot{c}(E,\beta,t) = \lambda v(E,\beta) c_b(t) e^{i(E-E_b)t/\hbar} \quad (15.b)$$

En intégrant (15.b), avec la condition initiale $c(E,\beta,0) = 0$, et en reportant la solution ainsi obtenue dans (15.a), on obtient

$$c_b(t) = -\frac{\lambda^2}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int_0^t dt' \Gamma_b(E) e^{i(E_b-E)(t-t')} c_b(t') \quad (16.a)$$

où $\Gamma_b(E)$ est défini en (11), c'est-à-dire encore

$$\dot{c}_b(t) = -\lambda^2 \int_0^t d\tau \gamma_b(\tau) c_b(t-\tau) \quad (16.b)$$

où

$$\gamma_b(\tau) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \Gamma_b(E) e^{i(E_b-E)\tau/\hbar} \quad (16.c)$$

L'équation intégrodifférentielle exacte (16.b) peut servir de point de départ pour plusieurs traitements : traitement perturbatif (où $c_b(t-\tau)$ est remplacé par $c_b(0) = 1$), traitement de Weisskopf-Wigner (où $c_b(t-\tau)$ est remplacé par $c_b(t)$ et sorti de l'intégrale). On peut également, sans faire aucune approximation, introduire les transformées de Fourier-Laplace de $c_b(t)$ et $\gamma_b(t)$ et transformer (16.b) en une équation algébrique, à partir de laquelle il est possible de dériver (13.b).

3. Les paramètres physiques importants

Avant d'indiquer la construction graphique de $\mathcal{U}_b(E)$, nous précisons l'allure et les propriétés essentielles des fonctions $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ apparaissant dans (13.b).

a) FONCTION $\Gamma_b(E)$

D'après sa définition (11), $\Gamma_b(E)$ caractérise le couplage induit par V entre l'état discret $|\varphi_b\rangle$ et la « couche » d'énergie E dans le

continuum. Il apparaît également clairement sur (11) que

$$\Gamma_b(E) \geq 0 \quad (17)$$

Comme le continuum part de $E = 0$ (voir (1.b)), la densité d'états $\rho(E, \beta)$ est nulle pour $E < 0$, de sorte que

$$\Gamma_b(E) = 0 \quad \text{pour} \quad E < 0 \quad (18)$$

Quand E augmente, $\rho(E, \beta)$ est en général une fonction croissante de E , alors que $|v(E, \beta)|^2$ tend vers 0 quand $E \rightarrow \infty$. Nous supposerons ici que $|v(E, \beta)|^2$ tend vers 0 suffisamment vite, pour que

$$\Gamma_b(E) \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad E \rightarrow \infty \quad (19)$$

Finalement, compte tenu de tous ces résultats, nous prenons pour $\Gamma_b(E)$ une fonction dont les variations avec E ont la forme représentée sur la figure 1. La largeur à mi-hauteur de cette fonction, $\hbar w_0$, peut être considérée comme la largeur du continuum

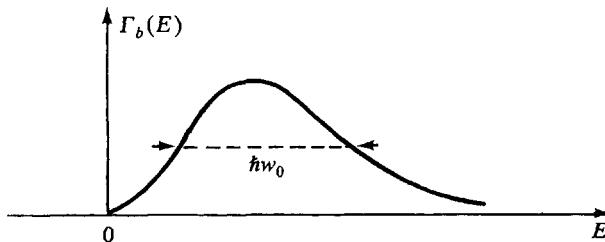


Figure 1. Allure de la fonction $\Gamma_b(E)$.

b) PARAMÈTRE Ω_1 CARACTÉRISANT LE COUPLAGE DE L'ÉTAT DISCRET AVEC TOUT LE CONTINUUM

Supposons un instant que tous les états $|E, \beta\rangle$ soient dégénérés en énergie avec $|\varphi_b\rangle$. L'état discret serait alors couplé uniquement à l'état $V|\varphi_b\rangle$, c'est-à-dire à la combinaison linéaire normée suivante

$$|\psi\rangle = \frac{\iint dE d\beta \rho(E, \beta) |E, \beta\rangle \langle E, \beta| V |\varphi_b\rangle}{\sqrt{\langle \varphi_b | V V | \varphi_b \rangle}} \quad (20)$$

l'élément de matrice de couplage entre $|\varphi_b\rangle$ et $|\psi\rangle$ étant

$$\begin{aligned} \langle \psi | V | \varphi_b \rangle &= \sqrt{\langle \varphi_b | V V | \varphi_b \rangle} = \\ &= \sqrt{\iint dE d\beta \rho(E, \beta) |v(E, \beta)|^2} \end{aligned} \quad (21)$$

La fréquence de Rabi Ω_1 de l'oscillation du système entre l'état $|\varphi_b\rangle$ et l'état $|\psi\rangle$ serait alors égale au module de (21) (divisé par \hbar).

En réalité, les états $|E, \beta\rangle$ ne sont pas dégénérés avec $|\varphi_b\rangle$ et ont une dispersion en énergie de l'ordre de $\hbar\omega_0$. On s'attend cependant, si le couplage λV est suffisamment fort, à ce que le système ait le temps d'osciller plusieurs fois entre $|\varphi_b\rangle$ et le continuum avant que l'effet de la dispersion $\hbar\omega_0$ sur les énergies des états $|E, \beta\rangle$ n'ait pu se faire sentir. Nous sommes donc conduits à introduire le paramètre

$$\Omega_1^2 = \frac{1}{\hbar^2} \iint dE d\beta \rho(E, \beta) |v(E, \beta)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \Gamma_b(E) \quad (22)$$

(où nous avons utilisé (11) pour la deuxième égalité). Nous verrons effectivement plus loin que $\lambda \Omega_1$ est bien la fréquence de l'oscillation de Rabi apparaissant pour $\lambda \gg 1$.

Notons finalement que $\Gamma_b(E)$ doit décroître suffisamment vite avec E pour que l'intégrale (22) soit convergente.

c) FONCTION $\Delta_b(E)$

Les relations (10) et (11) entraînent que

$$\Delta_b(E) = \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int dE' \frac{\Gamma_b(E')}{E - E'} \quad (23)$$

La relation de dispersion (23) permet de prévoir l'allure de $\Delta_b(E)$ à partir de celle de $\Gamma_b(E)$. Si $\Gamma_b(E)$ ressemble à une courbe en cloche (Fig. 1), $\Delta_b(E)$ ressemble à une courbe de dispersion (Fig. 2)

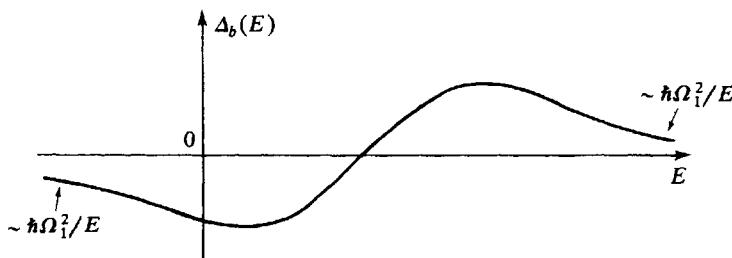


Figure 2. Allure de la fonction $\Delta_b(E)$.

Lorsque $|E| \gg \hbar\omega_0$, le dénominateur de (23) est équivalent à E puisque E' ne peut, à cause du numérateur $\Gamma_b(E')$, être très supérieur

à $\hbar\omega_0$. On en déduit que

$$\text{si } |E| \gg \hbar\omega_0, \quad \Delta_b(E) \simeq \frac{1}{2\pi E} \int dE' \Gamma_b(E') = \frac{\hbar\Omega_1^2}{E} \quad (24)$$

(nous avons utilisé (22) pour la deuxième égalité). Les ailes de la fonction $\Delta_b(E)$ décroissent donc en $1/E$.

4. Principe de la construction graphique

a) CONSTRUCTION POINT PAR POINT DE $\mathcal{U}_b(E)$

Sur la figure 3, sont représentées trois fonctions de E : $\hbar\lambda^2\Gamma_b(E)$, $\hbar\lambda^2\Delta_b(E)$, $E - E_b$ (droite de pente 1, coupant l'axe des E en E_b). Considérons alors une verticale d'abscisse E , et appelons A, B, C, D les intersections de cette verticale avec respectivement l'axe des abscisses, les courbes $\hbar\lambda^2\Gamma_b(E)$, $\hbar\lambda^2\Delta_b(E)$, $E - E_b$. Nous avons

$$AB = \hbar\lambda^2\Gamma_b(E) \quad CD = E - E_b - \hbar\lambda^2\Delta_b(E) \quad (25)$$

de sorte que l'expression (13.b) de $\mathcal{U}_b(E)$ peut s'écrire

$$\mathcal{U}_b(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{AB}{2} + \eta}{(CD)^2 + \left(\frac{AB}{2} + \eta\right)^2} \quad (26)$$

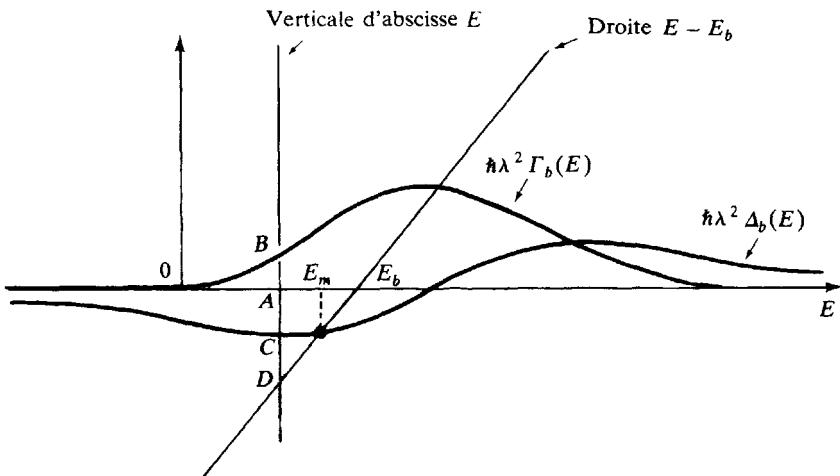


Figure 3. Construction graphique de $\mathcal{U}_b(E)$.

Pour chaque valeur de E , nous pouvons ainsi mesurer AB et CD , et déterminer $\mathcal{U}_b(E)$ par (26).

Comme toutes les quantités figurant au dénominateur de (26) sont positives, nous nous attendons à trouver un maximum de $\mathcal{U}_b(E)$ pour les valeurs de E telles que CD s'annule. Les abscisses E_m des maxima de $\mathcal{U}_b(E)$ sont donc données, d'après (25), par

$$E_m - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E_m) = 0 \quad (27)$$

b) DÉTERMINATION GRAPHIQUE DES ABSCISSES DES MAXIMA DE $\mathcal{U}_b(E)$. CLASSIFICATION DES DIVERS RÉGIMES

D'après (27), ces abscisses sont obtenues en recherchant les intersections de la courbe $\hbar \Delta_b(E)$ avec la droite $(E - E_b)/\lambda^2$ passant par E_b et de pente $1/\lambda^2$ (Figure 4).

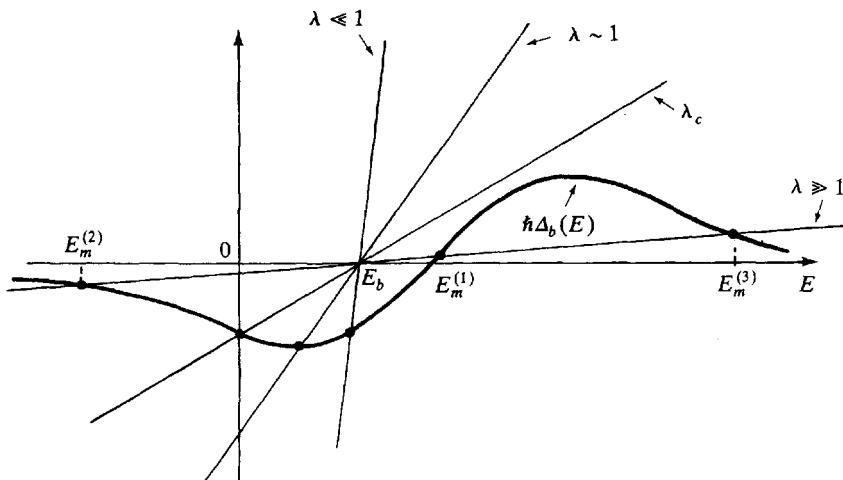


Figure 4. Détermination graphique des abscisses des maxima de $\mathcal{U}_b(E)$.

Pour un couplage faible ($\lambda \ll 1$), $(E - E_b)/\lambda^2$ est pratiquement une droite verticale, et il n'y a qu'un seul point d'intersection, dont l'abscisse est très proche de E_b : $E_m \approx E_b$. Une meilleure approximation s'obtient en remplaçant dans le dernier terme de (27), qui est très petit, E_m par E_b , ce qui donne

$$E_m = E_b + \hbar \lambda^2 \Delta_b(E_b) \quad (28)$$

Lorsque le couplage λ augmente, il apparaît sur la figure 4 que l'abscisse du point d'intersection de $\hbar \Delta_b(E)$ avec $(E - E_b)/\lambda^2$ se

déplace vers la gauche, jusqu'à ce que λ atteigne une valeur critique λ_c , au delà de laquelle E_m devient négatif, c'est-à-dire inférieur au début du continuum qui part de $E = 0$. (Des intersections nouvelles des deux courbes peuvent d'ailleurs apparaître). La valeur de λ_c est obtenue en faisant $E_m = 0$ dans (27)

$$\lambda_c^2 = - \frac{E_b}{\hbar \Delta_b(0)} = \frac{2\pi E_b}{\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dE \Gamma_b(E)/E} \quad (29)$$

(Nous avons utilisé (23) pour la deuxième égalité). Nous reviendrons plus loin (§ 6-b) sur la signification physique du couplage critique.

Pour les couplages très forts ($\lambda \gg 1$), la pente de la droite $(E - E_b)/\lambda^2$ devient très faible, et il apparaît sur la figure 4 que cette droite coupe en général la courbe $\hbar \Delta_b(E)$ en trois points, d'abscisses $E_m^{(1)}, E_m^{(2)}, E_m^{(3)}$. $E_m^{(1)}$ est très proche de l'abscisse du zéro de $\Delta_b(E)$. Quant aux abscisses $E_m^{(2)}$ et $E_m^{(3)}$, elles correspondent à des points situés dans les ailes de $\hbar \Delta_b(E)$, pour lesquelles l'expression asymptotique (24) de $\Delta_b(E)$ peut être utilisée. En reportant (24) dans (27), on obtient alors

$$E_m - E_b - \frac{\lambda^2 \hbar^2 \Omega_1^2}{E_m} = 0 \quad (30)$$

Comme E_b peut être négligé devant E_m , l'équation (30) donne

$$E_m^2 = \lambda^2 \hbar^2 \Omega_1^2 \quad (31)$$

c'est-à-dire encore

$$E_m^{(2)} = -\lambda \hbar \Omega_1 \quad (32.a)$$

$$E_m^{(3)} = +\lambda \hbar \Omega_1 \quad (32.b)$$

5. Couplage faible

a) DÉCROISSANCE EXPONENTIELLE DE WEISSKOPF-WIGNER

Quand $\lambda \ll 1$, le terme $[E - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E)]^2$ du dénominateur de (13.b) est très grand devant tous les autres, sauf au voisinage de $E = E_b$ où il s'annule. Il est donc légitime de remplacer, dans les termes très petits $\hbar \lambda^2 \Gamma_b(E)$ et $\hbar \lambda^2 \Delta_b(E)$, E par E_b puisque c'est seulement au voisinage de cette valeur de E que ces termes ne sont pas négligeables devant $[E - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E)]^2$. Il vient ainsi

$$\mathcal{U}_b(E) \simeq \frac{1}{\pi} \frac{\hbar \lambda^2 \Gamma_b/2}{[E - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b]^2 + [\hbar \lambda^2 \Gamma_b/2]^2} \quad (33)$$

où

$$\Gamma_b = \Gamma_b(E_b) , \quad \Delta_b = \Delta_b(E_b) \quad (34)$$

La transformée de Fourier de (33) est

$$U_b(\tau) = e^{-i(E_b + \hbar\lambda^2\Delta_b)\tau/\hbar} e^{-\lambda^2\Gamma_b|\tau|/2} \quad (35)$$

ce qui n'est autre que le résultat bien connu établi par Weisskopf et Wigner. Γ_b est la probabilité de transition par unité de temps de l'état discret $|\varphi_b\rangle$ vers le continuum, calculée par la règle d'or de Fermi, $\hbar\Delta_b$ le déplacement de cet état discret dû au couplage avec le continuum.

b) CORRECTIONS À LA DÉCROISSANCE EXPONENTIELLE

Une meilleure approximation que celle conduisant à (33) consiste à continuer à remplacer $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ par Γ_b et Δ_b au dénominateur de (13.b), où la dépendance en E est essentiellement déterminée par le terme $[E - E_b - \hbar\lambda^2\Delta_b(E)]^2$, mais à garder $\Gamma_b(E)$ au numérateur. Il vient ainsi

$$\mathcal{U}_b(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\lambda^2\Gamma_b(E)/2}{[E - E_b - \hbar\lambda^2\Delta_b]^2 + [\hbar\lambda^2\Gamma_b/2]^2} \quad (36)$$

Le fait que $\Gamma_b(E)$ soit nul pour $E < 0$ et tende vers zéro quand $E \rightarrow \infty$ (voir Fig. 1) montre alors que les ailes de $\mathcal{U}_b(E)$ tendent vers zéro plus vite que celles d'une lorentzienne. Ceci entraîne des corrections à la décroissance exponentielle (35) que nous discutons maintenant.

Tout d'abord, on peut considérer que l'expression (36) est le produit de la lorentzienne (33) par la fonction $\Gamma_b(E)/\Gamma_b$, qui vaut 1 pour $E = E_b$, et s'annule en dehors d'un intervalle dont la largeur est de l'ordre de quelques $\hbar w_0$. Il s'ensuit que la transformée de Fourier de (36) va être le produit de convolution de l'exponentielle (35) par la transformée de Fourier de $\Gamma_b(E)/\Gamma_b$. La fonction $\Gamma_b(E)$ ayant une largeur $\hbar w_0$, sa transformée de Fourier $\gamma_b(\tau)$ a une largeur en τ finie, qui est de l'ordre de $1/w_0$. Par ailleurs, $\Gamma_b(E)$ est strictement nul pour $E < 0$ et n'est pas infiniment dérivable en $E = 0$. Il en résulte que sa transformée de Fourier $\gamma_b(\tau)$ se comporte à l'infini comme une puissance de $(1/\tau)$. De façon plus précise, si $\Gamma_b(E)$ démarre comme E^n , $\gamma_b(\tau)$ varie comme $1/\tau^{n+1}$ à l'infini. Le produit de convolution de $\gamma_b(\tau)$ avec l'exponentielle (35) modifie donc le comportement de $U_b(\tau)$ aux temps courts et aux temps longs.

Aux temps courts, l'exponentielle (35) va se trouver « arrondie » et ne plus avoir de dérivée discontinue en $\tau = 0$. On peut d'ailleurs déterminer directement le comportement aux temps courts à partir de

(15). Si $t \ll 1/w_0$, les exponentielles $\exp[\pm i(E - E_b)t/\hbar]$ peuvent être remplacées par 1 (puisque $E - E_b$ est au plus de l'ordre de quelques $\hbar w_0$). L'intégration de (15.b) entre 0 et t donne alors

$$c(E, \beta, t) \simeq t \lambda v(E, \beta) / i\hbar \quad (37)$$

La conservation de la norme, et (22) entraînent

$$\begin{aligned} |c_b(t)|^2 &= 1 - \int \int dE d\beta \rho(E, \beta) |c(E, \beta, t)|^2 \\ &= 1 - t^2 \lambda^2 \hbar^{-2} \int \int dE d\beta \rho(E, \beta) |v(E, \beta)|^2 \\ &= 1 - \lambda^2 \Omega_F^2 t^2 \end{aligned} \quad (38)$$

Il apparaît ainsi qu'aux temps très courts ($t \ll 1/w_0$), $|c_b(t)|^2$ ne décroît pas linéairement avec t , comme le laisserait supposer (35), mais quadratiquement.

Aux temps longs ($\tau \gg \Gamma_b^{-1}$), le produit de convolution de l'exponentielle (35) avec $\gamma_b(\tau)$, se comporte comme celle des deux fonctions qui décroît le plus lentement, donc comme $1/\tau^{n+1}$.

6. Couplage intermédiaire - Couplage critique

Lorsque λ augmente, les déviations de $\mathcal{U}_b(E)$ par rapport à une lorentzienne deviennent de plus en plus importantes. Des structures larges peuvent apparaître dans les ailes de $\mathcal{U}_b(E)$, ainsi que des nouveaux maxima. Avant d'aller plus loin, il est important de préciser la forme de $\mathcal{U}_b(E)$ au voisinage d'un de ces maxima.

a) DÉVELOPPEMENT DE $\mathcal{U}_b(E)$ AU VOISINAGE D'UN MAXIMUM

Au voisinage d'un zéro E_m de l'équation (27), nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} E - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E) &= \\ &= E_m - E_b - \hbar \lambda^2 \Delta_b(E_m) + E - E_m - \hbar \lambda^2 [\Delta_b(E) - \Delta_b(E_m)] \\ &= (E - E_m)[1 - \hbar \lambda^2 \Delta'_b(E_m)] \end{aligned} \quad (39)$$

Nous avons utilisé (27) et développé $\Delta_b(E) - \Delta_b(E_m)$ à l'ordre 1 en $(E - E_m)$. Posons

$$\Gamma_b(E_m) = \Gamma_m \quad (40.a)$$

$$\Delta'_b(E_m) = \Delta'_m \quad (40.b)$$

et reportons (39) dans le dénominateur de (13.b). Nous obtenons pour

$\mathcal{U}_b(E)$ au voisinage de E_m

$$\mathcal{U}_b(E) = \frac{1}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} \underset{\eta \rightarrow 0_+}{\text{Lim}} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\hbar\gamma_m}{2}}{(E - E_m)^2 + \left(\frac{\hbar\gamma_m}{2}\right)^2} \quad (41)$$

avec

$$\hbar\gamma_m = \frac{2\eta + \hbar\lambda^2 \Gamma_m}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} \quad (42)$$

Il apparaît ainsi qu'au voisinage d'un maximum d'abscisse E_m , $\tilde{U}_b(E)$ a la forme d'une lorentzienne, centrée en $E = E_m$, de largeur $\hbar\gamma_m$ à mi-hauteur donnée par (42), et de poids $1/(1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m)$. Bien sûr, ces résultats ne sont valables que si $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ varient peu sur la largeur $\hbar\gamma_m$ de cette lorentzienne, c'est-à-dire si

$$\gamma_m \ll w_0 \quad (43)$$

b) SENS PHYSIQUE DU COUPLAGE CRITIQUE

Dès que λ dépasse λ_c , on voit sur la figure 4 que la droite $(E - E_b)/\lambda^2$ coupe la courbe $\hbar\Delta_b(E)$ en un point d'abscisse E_m négative. Utilisons alors les résultats du paragraphe précédent pour préciser la forme de $\mathcal{U}_b(E)$ au voisinage de cette valeur E_m .

Comme $\Gamma_b(E)$ est nul pour E négatif et que E_m est négatif, $\Gamma_b(E_m) = \Gamma_m$ est nul et par suite d'après (42)

$$\hbar\gamma_m = \frac{2\eta}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} = 2\eta' \rightarrow 0 \quad (44)$$

L'approximation (41) de $\mathcal{U}_b(E)$ est alors certainement valable puisque, γ_m étant nul d'après (44), la condition (43) est remplie. Il vient alors, au voisinage de $E = E_m$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_b(E) &= \frac{1}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} \underset{\eta \rightarrow 0_+}{\text{Lim}} \frac{1}{\pi} \frac{\eta'}{(E - E_m)^2 + \eta'^2} \\ &= \frac{1}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} \delta(E - E_m) \end{aligned} \quad (45)$$

Nous trouvons ainsi que, pour $\lambda > \lambda_c$, une fonction delta apparaît dans $\mathcal{U}_b(E)$, centrée en $E = E_m$ dans la région $E < 0$. Cette fonction delta donne naissance, d'après (13.a), à une oscillation *non amortie* dans

$U_b(\tau)$ de la forme

$$\frac{1}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} e^{-iE_m \tau / \hbar} \quad (46)$$

Physiquement, le couplage a déplacé l'état discret initial $|\varphi_b\rangle$ vers les énergies négatives d'une quantité si importante que cet état discret est passé en dessous du continuum et est devenu stable puisqu'il n'y a plus d'états du continuum de même énergie que lui vers lesquels il puisse se désintégrer.

7. Couplage fort

Pour $\lambda \gg 1$, la figure 4 montre qu'il y a trois points d'intersection entre la droite $(E - E_b)/\lambda^2$ et la courbe $\hbar\Delta_b(E)$, d'abscisses $E_m^{(1)}$, $E_m^{(2)}$, $E_m^{(3)}$.

Celui qui est le plus à gauche a une abscisse $E_m^{(2)}$ négative. $\mathcal{U}_b(E)$ est donc au voisinage de ce point une fonction delta donnée par (45). Comme $\lambda \gg 1$, on peut utiliser la valeur asymptotique (32.a) pour $E_m^{(2)}$, $E_m^{(2)} = -\lambda\hbar\Omega_1$, ainsi que l'expression asymptotique (24) de $\Delta_b(E)$ pour calculer $\Delta'_m = \Delta'_b(E_m)$. Il vient ainsi $\Delta'_b(E) = -\hbar\Omega_1^2/E^2$ et par suite

$$\Delta'_b(E_m) = \Delta'_b(-\lambda\hbar\Omega_1) = -\frac{\hbar\Omega_1^2}{\lambda^2\hbar^2\Omega_1^2} = -\frac{1}{\hbar\lambda^2} \quad (47)$$

de sorte que

$$\frac{1}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} = \frac{1}{2} \quad (48)$$

Ainsi, l'expression de $\mathcal{U}_b(E)$ contient, en $E = -\lambda\hbar\Omega_1$, une fonction delta de poids 1/2.

Considérons maintenant l'autre intersection d'abscisse $E_m^{(3)} = +\lambda\hbar\Omega_1$ (voir (32.b)). Au voisinage de cette valeur de E , $\mathcal{U}_b(E)$ se comporte comme une lorentzienne donnée par (41). Un calcul, identique à celui qui précède, montre que le poids, $1/(1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m)$, de cette lorentzienne est lui aussi égal à 1/2. Quant à sa largeur γ_m , elle vaut d'après (42)

$$\gamma_m = \frac{\lambda^2 \Gamma_b(\lambda\hbar\Omega_1)}{1 - \hbar\lambda^2 \Delta'_m} = \frac{1}{2} \lambda^2 \Gamma_b(\lambda\hbar\Omega_1) \quad (49)$$

Si $\Gamma_b(E)$ décroît plus vite que $1/E^2$ quand E tend vers l'infini, cette largeur γ_m tend vers 0 quand $\lambda \rightarrow \infty$. Elle tend vers une constante si $\Gamma_b(E)$ varie en $1/E^2$. Enfin, elle diverge si $\Gamma_b(E)$ tend vers zéro moins vite que $1/E^2$.

Il reste à examiner la contribution du troisième point d'intersection en $E_m^{(1)}$, au voisinage du zéro de $\Delta_b(E)$. Revenons à l'expression (13.b) de $\mathcal{U}_b(E)$. Nous voyons que, sur un intervalle de quelques $\hbar w_0$ à droite de $E = 0$, $E - E_b$ peut être négligé devant $\hbar \lambda^2 \Gamma_b(E)$ et $\hbar \lambda^2 \Delta_b(E)$, puisque $\lambda \gg 1$, de sorte que $\mathcal{U}_b(E)$ est proportionnel à $1/\lambda^2$ dans cet intervalle. Il apparaît ainsi que dans ce même intervalle, $\mathcal{U}_b(E)$ se comporte comme une courbe de largeur de l'ordre de $\hbar w_0$ et dont le poids, en $1/\lambda^2$, tend vers zéro quand $\lambda \rightarrow \infty$. L'approximation lorentzienne (41) n'est d'ailleurs plus valable dans ce cas car $\Gamma_b(E)$ et $\Delta_b(E)$ varient beaucoup dans l'intervalle $\hbar w_0$.

Finalement, les variations de $\mathcal{U}_b(E)$ avec E , pour $\lambda \gg 1$, ont l'allure représentée sur la figure 5.

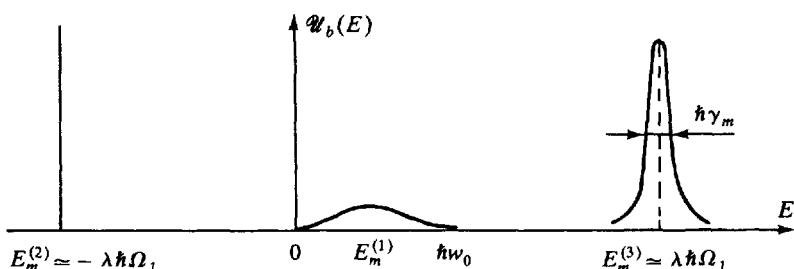


Figure 5. Allure de variations de $\mathcal{U}_b(E)$ pour $\lambda \gg 1$.

Comme le poids de la structure centrale tend vers zéro quand $\lambda \rightarrow \infty$, le comportement de $U_b(\tau)$ est essentiellement une oscillation de la forme

$$\frac{1}{2} e^{i\lambda\Omega_1\tau} + \frac{1}{2} e^{-i\lambda\Omega_1\tau} = \cos \lambda \Omega_1 \tau \quad (50)$$

due au battement entre les transformées de Fourier des deux courbes étroites de la figure 5, qui ont chacune un poids $1/2$ (nous négligeons pour l'instant la largeur γ_m de la courbe de droite). Nous retrouvons bien ainsi l'oscillation de Rabi à la fréquence $\lambda \Omega_1$ quand λ devient très grand. Il y a cependant des corrections à cette oscillation.

(i) Aux temps très courts ($\tau \ll w_0^{-1}$), des petites corrections, en $1/\lambda^2$, dues à la structure large centrale de la figure 5, apparaissent. Elles s'amortissent en un temps de l'ordre de $1/w_0$.

(ii) La contribution de la courbe de droite de la figure est amortie avec un temps de l'ordre de $1/\gamma_m$, où γ_m est la largeur de cette courbe. L'oscillation de Rabi est donc amortie avec une constante de temps de l'ordre de $1/\gamma_m$.

(iii) Aux temps très longs ($\tau \gg 1/\gamma_m$) seule subsiste la contribution de la fonction delta centrée en $-\lambda\hbar\Omega_1$, qui vaut $e^{i\lambda\Omega_1\tau}/2$ et qui ne s'amortit pas.

Le point (ii) montre clairement qu'il est impossible d'obtenir une oscillation de Rabi non amortie, comme c'est le cas pour deux vrais états discrets couplés. Le couplage avec un continuum introduit une irréversibilité fondamentale dans le problème, qui ne disparaît jamais, même aux couplages très forts.

Finalement, nous avons pu montrer sur un modèle très simple l'existence d'une transition continue entre deux régimes extrêmes, la décroissance exponentielle de Weisskopf-Wigner et l'oscillation de Rabi, tout en précisant les corrections qui doivent être apportées à ces deux régimes extrêmes.

CHAPITRE IV

Le rayonnement considéré comme un réservoir : équation pilote pour les particules

A - INTRODUCTION - IDÉE GÉNÉRALE

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'*évolution des seules particules* et nous nous proposons d'établir des équations décrivant une telle évolution. Un exemple célèbre d'une telle démarche est celle d'Einstein, introduisant en 1917 les équations décrivant l'effet des processus d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée entre les niveaux *a* et *b* d'un atome plongé dans le rayonnement du corps noir (*):

$$\begin{cases} \frac{dN_b}{dt} = -A_{b \rightarrow a} N_b + u(\omega) (B_{a \rightarrow b} N_a - B_{b \rightarrow a} N_b) \\ \frac{dN_a}{dt} = A_{b \rightarrow a} N_b + u(\omega) (B_{b \rightarrow a} N_b - B_{a \rightarrow b} N_a) \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Dans (A.1), N_a et N_b sont les nombres d'atomes dans les états *a* et *b* ($E_b > E_a$), $A_{b \rightarrow a}$ la probabilité d'émission spontanée par unité de temps de *b* vers *a*, $B_{a \rightarrow b}$ (et $B_{b \rightarrow a}$) les probabilités d'absorption (et d'émission induite) de *a* vers *b* (et de *b* vers *a*), $u(\omega)$ la densité d'énergie du rayonnement à la fréquence $\omega = (E_b - E_a)/\hbar$. Le but de ce chapitre est de justifier et de généraliser des équations de ce type à partir des équations de base de l'électrodynamique quantique décrivant l'évolution couplée des particules et du champ.

Notons tout d'abord que les particules, formant un sous-système d'un système plus vaste, ne peuvent être décrites que par un *opéra-*

(*) A. Einstein, Physik. Zeitschr. 18, 121 (1917).

teur densité. En effet, même si le système global est dans un état pur, décrit par un vecteur d'état, l'état des particules est en général un *mélange statistique d'états*. L'opérateur densité σ décrivant un tel mélange est obtenu par *trace partielle* sur les variables du rayonnement de l'opérateur densité ρ du système global :

$$\sigma = \text{Tr}_R \rho \quad (\text{A.2.a})$$

c'est-à-dire encore, en termes d'éléments de matrice,

$$\langle a | \sigma | b \rangle = \sigma_{ab} = \sum_{\mu} \langle a, \mu | \rho | b, \mu \rangle = \sum_{\mu} \rho_{a\mu b\mu} \quad (\text{A.2.b})$$

les indices (latins) a et b repérant les états des particules, les indices (grecs) μ ceux du rayonnement (*). Ainsi, l'état de l'atome à deux niveaux a et b introduit plus haut est décrit par la *matrice densité* :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{bb} & \sigma_{ba} \\ \sigma_{ab} & \sigma_{aa} \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

En plus des « *populations* » σ_{bb} et σ_{aa} des deux niveaux, proportionnelles aux quantités N_b et N_a apparaissant dans (A.1), on voit apparaître des éléments non-diagonaux ou « *cohérences* » entre a et b , reliés à certaines grandeurs physiques, évoluant à la fréquence $(E_b - E_a)/\hbar$, comme le moment dipolaire électrique de l'atome.

Avant d'essayer d'établir une équation d'évolution pour σ , il peut être utile de s'inspirer d'autres exemples de physique classique où l'on s'intéresse à l'évolution d'une partie seulement d'un système global.

Considérons par exemple le *mouvement brownien* d'une particule lourde plongée dans un gaz ou dans un liquide de particules légères avec lesquelles elle subit des collisions incessantes. Par suite de la différence de masse, il faut un très grand nombre de collisions pour faire varier de manière appréciable la vitesse de la particule lourde. Comment décrit-on alors le mouvement de la particule lourde ? Une première possibilité est d'introduire une « *équation de Langevin* », où l'effet du fluide sur la particule est décrit par deux types de force : une « *force de friction* », qui décrit l'effet cumulatif des collisions et qui amortit la vitesse de la particule au bout d'un temps caractéristique T_R ; une « *force de Langevin* », qui décrit les fluctuations de la force instantanée autour de sa valeur moyenne, et qui varie avec un temps caractéristique de l'ordre du temps de collision τ_c , beaucoup plus court que T_R . Une autre possibilité consiste à essayer d'établir une équation d'évolution pour la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ de la position et de l'impulsion de la

(*) Il est clair que l'information contenue dans σ est moins riche que celle contenue dans ρ . En particulier, l'opérateur densité réduit σ ne décrit ni le rayonnement, ni les corrélations qui existent entre particules et rayonnement.

particule lourde. On étudie en général la variation Δf de f sur un intervalle de temps Δt très court devant T_R (pour que la vitesse moyenne de la particule ait peu varié), mais très long devant τ_c (pour que plusieurs collisions élémentaires aient eu le temps de se dérouler entièrement). L'équation donnant $\Delta f / \Delta t$ est alors simple. C'est une équation de *Fokker-Planck*, décrivant comment la fonction de distribution se déplace et s'élargit sous l'effet des collisions.

Nous retiendrons de l'exemple précédent les idées générales suivantes. Tout d'abord, la particule étudiée \mathcal{A} interagit avec un système \mathcal{R} possédant un très grand nombre de degrés de liberté (l'ensemble des autres particules du gaz ou du liquide). La « capacité calorifique » de \mathcal{R} est donc très grande, et il n'y a pas de modification macroscopique de l'état de \mathcal{R} sous l'effet du couplage avec \mathcal{A} . \mathcal{R} peut être considéré comme un « réservoir ». Ensuite, l'équation d'évolution de \mathcal{A} est simple, s'il y a *deux échelles de temps bien distinctes* dans le problème, un temps très court τ_c caractérisant les fluctuations de la perturbation exercée par \mathcal{R} sur \mathcal{A} , et un temps beaucoup plus long T_R caractérisant la vitesse de variation de \mathcal{A} . Si l'on se contente d'une *vitesse de variation à « gros grains »*, moyennée sur un temps Δt tel que $\tau_c \ll \Delta t \ll T_R$, alors, des *équations cinétiques simples* peuvent être obtenues pour les fonctions de distribution de \mathcal{A} .

Est-il possible d'étendre les idées précédentes au cas où \mathcal{A} est un ensemble de particules (que nous supposons ici former un atome ou une molécule), et \mathcal{R} le rayonnement ? Tout d'abord, \mathcal{R} possède bien une infinité de degrés de liberté, correspondant au nombre infini de modes du champ électromagnétique. Si \mathcal{A} est un atome (ou un petit nombre d'atomes), il est légitime de considérer que l'état de \mathcal{R} change très peu au cours du temps par suite du couplage avec \mathcal{A} . Quelles sont ensuite les conditions d'apparition de deux échelles de temps bien distinctes ? La dynamique des fluctuations des champs (électrique et magnétique) agissant sur les particules chargées est décrite par les *fonctions de corrélation* de ces champs. Or, on peut montrer (*) que, si l'état du champ est le vide (ce qui correspond au problème de l'émission spontanée de photons par \mathcal{A}), ces fonctions de corrélations $\langle E(t)E(t-\tau) + E(t-\tau)E(t) \rangle$ décroissent très vite avec τ . Le temps de corrélation τ_c des « fluctuations du vide » est très court, plus court que la période $2\pi/\omega_0$ de la transition $b \rightarrow a$ étudiée, elle-même beaucoup plus courte que la durée de vie $1/\Gamma$ du niveau b , qui caractérise l'évolution de l'atome. Il en est de même pour le problème d'un atome interagissant avec une onde incidente dont la largeur

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes – Introduction à l'Electrodynamique Quantique », § III-C-3 et complément C_{III} .

spectrale $\Delta\omega$ est suffisamment grande (*) et l'intensité suffisamment faible. En effet, le temps de corrélation du champ incident est de l'ordre de $\tau_c = \Delta\omega^{-1}$, et le temps moyen T_R au bout duquel un processus d'absorption ou d'émission induite se produit (temps d'évolution de l'atome) est inversement proportionnel à l'intensité lumineuse I , de sorte que pour des valeurs convenables de $\Delta\omega$ et I , la condition $\tau_c \ll T_R$ est réalisée. C'est en particulier le cas pour le rayonnement du corps noir, ou pour le rayonnement émis par des sources ordinaires (comme des lampes à décharge), qui ne sont ni très monochromatiques, ni très intenses.

Nous voyons ainsi qu'il existe un grand nombre de situations où le rayonnement peut être considéré comme un réservoir exerçant sur l'atome une perturbation qui varie très vite à l'échelle du temps d'évolution de l'atome. Nous montrons, dans ce chapitre IV, comment « *l'équation pilote* » donnant la vitesse de variation à gros grains de l'opérateur densité de \mathcal{A} peut être établie simplement et de manière *perturbative* lorsque le couplage V entre \mathcal{A} et \mathcal{R} a un effet faible pendant le temps de corrélation τ_c des fluctuations de \mathcal{R} . Il s'agit là d'une situation rappelant celle des collisions faibles du mouvement brownien, la condition sur la faiblesse de l'effet du couplage pendant τ_c portant le nom de condition de « *rétrécissement par le mouvement* » pour des raisons qui apparaîtront plus loin. Nous commençons (partie B) par établir l'équation pilote. Nous donnons ensuite une interprétation physique des coefficients qui apparaissent dans cette équation (partie C) et nous discutons les conditions de validité des approximations utilisées pour établir l'équation pilote (partie D). Les résultats établis dans ces trois parties sont valables de façon générale pour tout petit système \mathcal{A} couplé à un réservoir \mathcal{R} , pourvu que la condition de rétrécissement par le mouvement soit satisfaite.

Nous revenons dans la partie E au problème d'un atome à deux niveaux couplé au rayonnement et nous utilisons les résultats précédents pour établir les équations d'évolution de la matrice densité atomique sous l'influence des processus d'émission spontanée, d'absorption et d'émission induite. Nous nous intéressons non seulement aux degrés de liberté internes (populations des deux niveaux a et b et cohérence entre a et b), mais aussi à l'évolution des degrés de liberté externes (vitesse du centre de masse) sous l'effet des échanges d'impulsions entre atome et photons.

Trois compléments prolongent la discussion de ce chapitre. Le complément A_{IV} montre que les moyennes à deux temps apparaissant dans l'équation pilote peuvent être reliées à deux catégories de

(*) Nous excluons ici le cas où l'atome interagit de manière résonnante avec un rayonnement monochromatique (voir chapitres V et VI).

fonctions statistiques, les fonctions de corrélation symétriques qui décrivent la dynamique des fluctuations des observables de \mathcal{A} et \mathcal{B} , et les susceptibilités linéaires qui décrivent la réponse linéaire de chaque système à une perturbation extérieure. L'utilisation de ces fonctions permet de montrer alors que les divers effets physiques décrits par l'équation pilote peuvent être interprétés très simplement en considérant que chacun des deux systèmes en interaction, \mathcal{A} et \mathcal{B} , fluctue et polarise l'autre. Les compléments B_{IV} et C_{IV} illustrent les diverses notions introduites dans le chapitre sur l'exemple simple d'un oscillateur harmonique couplé à un réservoir d'oscillateurs harmoniques. L'évolution de l'oscillateur est étudiée, aussi bien dans le point de vue de Schrödinger (complément B_{IV}) que dans celui de Heisenberg (complément C_{IV}). On montre notamment que les équations de Heisenberg relatives à l'oscillateur matériel peuvent être transformées et mises sous une forme qui rappelle l'équation de Langevin du mouvement brownien. Un tel point de vue permet d'illustrer le lien étroit qui existe de façon générale entre fluctuations et dissipation.

**B - ÉTABLISSEMENT DE L'ÉQUATION PILOTE
D'UN PETIT SYSTÈME \mathcal{A}
COUPLÉ A UN RÉSERVOIR \mathcal{R}**

1. Equation d'évolution du petit système en représentation d'interaction

Soit

$$H = H_A + H_R + V \quad (\text{B.1})$$

l'hamiltonien du système global $\mathcal{A} + \mathcal{R}$: H_A est l'hamiltonien de \mathcal{A} , H_R celui de \mathcal{R} , V l'interaction entre \mathcal{A} et \mathcal{R} . L'opérateur densité ρ du système global $\mathcal{A} + \mathcal{R}$ obéit à l'équation d'évolution

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)] \quad (\text{B.2})$$

qui devient, en représentation d'interaction par rapport à $H_A + H_R$:

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)] \quad (\text{B.3})$$

avec

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i(H_A + H_R)t/\hbar} \rho(t) e^{-i(H_A + H_R)t/\hbar} \quad (\text{B.4.a})$$

$$\tilde{V}(t) = e^{-i(H_A + H_R)t/\hbar} V e^{i(H_A + H_R)t/\hbar} \quad (\text{B.4.b})$$

L'avantage de la représentation d'interaction est que, si V est suffisamment petit, $\tilde{\rho}(t)$ évolue lentement et ne contient plus en particulier les exponentielles d'évolution libre non perturbée.

Intégrons l'équation (B.3) entre t et $t + \Delta t$. Il vient

$$\tilde{\rho}(t + \Delta t) = \tilde{\rho}(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t + \Delta t} dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')] \quad (\text{B.5})$$

équation qui peut être itérée pour donner

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{\rho}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t + \Delta t} dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t)] + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_t^{t + \Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' [\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\rho}(t'')]] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

où l'on a posé

$$\Delta \tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(t + \Delta t) - \tilde{\rho}(t) \quad (\text{B.7})$$

Nous nous intéressons ici à l'évolution du petit système \mathcal{A} . L'équation (A.2.a) qui définit l'opérateur densité réduit σ de \mathcal{A} à partir de

l'opérateur densité ρ de $\mathcal{A} + \mathcal{R}$ devient en représentation d'interaction

$$\tilde{\sigma}(t) = \text{Tr}_R \tilde{\rho}(t) \quad (\text{B.8})$$

En prenant la trace par rapport à \mathcal{R} des deux membres de l'équation (B.6), nous obtenons donc

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\sigma}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_R [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t)] + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_R [\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\rho}(t'')]] \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Jusqu'ici, aucune approximation n'a été introduite et l'équation (B.9) est exacte. Avant d'aller plus loin et d'introduire des approximations, il nous faut maintenant préciser les hypothèses faites sur le réservoir.

2. Hypothèses sur le réservoir

a) ÉTAT DU RÉSERVOIR

Soit

$$\tilde{\sigma}_R(t) = \text{Tr}_A \tilde{\rho}(t) \quad (\text{B.10})$$

l'opérateur densité de \mathcal{R} obtenu par trace partielle sur \mathcal{A} de $\tilde{\rho}(t)$. Comme \mathcal{R} est un réservoir, la variation de $\tilde{\sigma}_R(t)$ due au couplage avec \mathcal{A} est faible. Dans une première approximation, $\tilde{\sigma}_R(t)$ peut être considéré comme constant en représentation d'interaction (*):

$$\tilde{\sigma}_R(t) \approx \tilde{\sigma}_R(0) = \sigma_R \quad (\text{B.11})$$

Nous supposerons de plus que le réservoir est dans un état stationnaire, c'est-à-dire que σ_R commute avec H_R

$$[\sigma_R, H_R] = 0 \quad (\text{B.12})$$

En d'autres termes, σ_R n'a pas d'éléments non diagonaux entre états propres de H_R de valeurs propres différentes et peut donc être considéré comme un mélange statistique des états propres $|\mu\rangle$ de H_R

$$H_R |\mu\rangle = E_\mu |\mu\rangle \quad (\text{B.13})$$

(*) Le couplage V fait bien sûr apparaître des corrélations entre \mathcal{A} et \mathcal{R} qui sont faibles, mais essentielles pour l'évolution de \mathcal{A} (voir § D 4).

avec des poids p_μ

$$\sigma_R = \sum_\mu p_\mu |\mu\rangle\langle\mu| \quad (\text{B.14})$$

C'est en particulier le cas lorsque \mathcal{R} est en équilibre thermodynamique à la température T , les p_μ valant alors

$$p_\mu = Z^{-1} e^{-E_\mu/k_B T} \quad (\text{B.15.a})$$

$$Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/k_B T} \quad (\text{B.15.b})$$

b) VALEURS MOYENNES À UN ET DEUX TEMPS DES OBSERVABLES DE \mathcal{A} COUPLEDÉS À \mathcal{R} .

L'interaction V entre \mathcal{A} et \mathcal{R} sera prise sous la forme d'un produit d'une observable A de \mathcal{A} par une observable R de \mathcal{R} .

$$V = -A R \quad (\text{B.16})$$

ce qui donne, en représentation d'interaction

$$\tilde{V}(t) = -\tilde{A}(t) \tilde{R}(t) \quad (\text{B.17})$$

avec

$$\tilde{A}(t) = e^{iH_A t/\hbar} A e^{-iH_A t/\hbar} \quad (\text{B.18.a})$$

$$\tilde{R}(t) = e^{iH_R t/\hbar} R e^{-iH_R t/\hbar} \quad (\text{B.18.b})$$

puisque les observables de \mathcal{A} commutent avec celles de \mathcal{R} .

Remarque

Les calculs qui suivent peuvent être aisément adaptés au cas plus général où V est une somme de produits d'opérateurs A_p de \mathcal{A} par des opérateurs R_p de \mathcal{R} , de la forme $-\sum_p A_p R_p$.

Nous supposerons que la valeur moyenne de R dans l'état σ_R de R est nulle

$$\text{Tr}[\sigma_R R] = \text{Tr}[\sigma_R \tilde{R}(t)] = 0 \quad (\text{B.19})$$

la première égalité découlant de (B.18.b), (B.12) et de l'invariance de la trace d'un produit dans une permutation circulaire. Il s'ensuit que, pour tout t

$$\text{Tr}_R[\sigma_R \tilde{V}(t)] = \tilde{A}(t) \text{Tr}[\sigma_R \tilde{R}(t)] = 0 \quad (\text{B.20})$$

La valeur moyenne dans σ_R du couplage $\tilde{V}(t)$ est donc nulle. Si ce

n'était pas le cas, il suffirait d'ailleurs de réinclure $\text{Tr}_R[\sigma_R V]$ dans H_A et de prendre $V - (\text{Tr}_R[\sigma_R V]) \otimes \mathbb{1}_R$ comme nouvel hamiltonien d'interaction, $\mathbb{1}_R$ étant l'opérateur unité dans l'espace des états de \mathcal{H} .

La valeur moyenne de $\tilde{R}(t)$ dans σ_R est une moyenne à un temps t . Considérons maintenant la « valeur moyenne à deux temps » t' et t''

$$g(t', t'') = \text{Tr}[\sigma_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')] \quad (\text{B.21})$$

égale à la valeur moyenne dans l'état σ_R d'un produit de deux observables $\tilde{R}(t')$ et $\tilde{R}(t'')$ prises à deux instants différents t' et t'' . Nous analysons dans le complément A_{IV} la signification physique des fonctions $g(t', t'')$. Nous montrons en particulier que la partie réelle de $g(t', t'')$ est une fonction de corrélation symétrique décrivant la *dynamique des fluctuations* de R dans l'état σ_R , alors que la partie imaginaire de $g(t', t'')$ est reliée à une *susceptibilité linéaire*. En utilisant (B.12), (B.18.b) et l'invariance de la trace d'un produit dans une permutation circulaire, on démontre aisément que $g(t', t'')$ ne dépend que de $\tau = t' - t''$, puisque

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R[\sigma_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')] &= \text{Tr}_R[\sigma_R e^{iH_R t'/\hbar} R e^{-iH_R(t' - t'')/\hbar} R e^{-iH_R t''/\hbar}] \\ &= \text{Tr}_R[\sigma_R \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0)] = g(\tau) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Pour évaluer de manière plus précise $g(\tau)$, reportons l'expression (B.14) de σ_R dans (B.22). Il vient

$$\begin{aligned} g(\tau) &= \text{Tr} \sum_{\mu} \{ p_{\mu} | \mu \rangle \langle \mu | \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) \} \\ &= \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \mu | \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) | \mu \rangle \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\nu} p_{\mu} | R_{\mu\nu} |^2 e^{i\omega_{\mu\nu}\tau} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

où nous avons posé

$$R_{\mu\nu} = \langle \mu | R | \nu \rangle \quad (\text{B.24})$$

$$\omega_{\mu\nu} = \omega_{\mu} - \omega_{\nu} \quad (\text{B.25.a})$$

$$\omega_{\mu} = E_{\mu}/\hbar \quad (\text{B.25.b})$$

Comme p_{μ} et $|R_{\mu\nu}|^2$ sont réels, il est clair sur (B.23) que

$$g(-\tau) = g(\tau)^* \quad (\text{B.26})$$

L'expression (B.23) montre que $g(\tau)$ est une superposition d'exponentielles oscillant aux diverses fréquences de Bohr $\omega_{\mu\nu}$ de \mathcal{H} . Comme

\mathcal{R} est un réservoir, il possède un ensemble très dense de niveaux d'énergie et par suite un spectre quasicontinu de fréquences de Bohr, de sorte que les exponentielles de (B.23) vont très vite se brouiller. Plus précisément, nous supposerons ici que la fonction $g(\tau)$ tend rapidement vers zéro quand τ tend vers l'infini, et nous désignerons par τ_c l'ordre de grandeur de la largeur en τ de $g(\tau)$.

Finalement, les hypothèses faites sur \mathcal{R} reviennent à supposer que \mathcal{R} est dans un état stationnaire et exerce sur \mathcal{A} une « force » fluctuant autour d'une valeur moyenne nulle, avec un temps de mémoire, ou encore un temps de corrélation τ_c court.

3. Calcul perturbatif de la vitesse de variation à gros grains du petit système

Revenons maintenant à l'équation exacte (B.9). Nous allons en déduire une équation pilote pour $\tilde{\sigma}$ en introduisant un certain nombre d'approximations dont les conditions de validité seront précisées et discutées plus loin (partie D).

Si V est suffisamment petit, et si Δt est suffisamment court devant le temps d'évolution T_R de $\tilde{\sigma}$, il semble légitime, dans le dernier terme de (B.9) qui est déjà d'ordre deux en V , de négliger l'évolution de $\tilde{\rho}$ entre t et t'' , et de remplacer $\tilde{\rho}(t'')$ par $\tilde{\rho}(t)$. Une telle approximation revient à arrêter l'itération de (B.5) à l'ordre 2 inclus en V .

Après une telle approximation, le second membre de (B.9) ne contient plus que $\tilde{\rho}(t)$, qui peut toujours être écrit sous la forme

$$\tilde{\rho}(t) = \text{Tr}_R \tilde{\rho}(t) \otimes \text{Tr}_A \tilde{\rho}(t) + \tilde{\rho}_{\text{correl}}(t) \quad (\text{B.27})$$

où $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t)$, qui est égal à l'écart entre $\tilde{\rho}(t)$ et le produit des opérateurs densités réduits de \mathcal{A} et \mathcal{R} , décrit les corrélations qui existent entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t . Nous négligerons dans la suite la contribution de $\tilde{\rho}_{\text{correl}}$ à $\Delta \tilde{\sigma}(t)$. Nous reviendrons plus loin (partie D) sur les conditions de validité d'une telle approximation, qui reposent en particulier sur l'inégalité $\tau_c \ll \Delta t$. L'idée générale est que les corrélations initiales entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t s'évanouissent au bout d'un temps τ_c et contribuent peu à l'évolution de $\tilde{\sigma}$ sur l'intervalle $[t, t + \Delta t]$, beaucoup plus long que τ_c (*). Une telle approximation revient donc à écrire, compte tenu de (B.8), (B.10) et (B.11)

$$\tilde{\rho}(t) \simeq \tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R \quad (\text{B.28})$$

Nous avons ainsi introduit deux approximations, l'une reposant sur la condition $\Delta t \ll T_R$, l'autre sur la condition $\Delta t \gg \tau_c$, ce qui implique

(*) De nouvelles corrélations entre \mathcal{A} et \mathcal{R} apparaissent entre t et $t + \Delta t$, et ce sont elles qui font évoluer $\tilde{\sigma}$.

l'existence de deux échelles de temps très différentes $T_R \gg \tau_c$

$$\tau_c \ll \Delta t \ll T_R \quad (\text{B.29})$$

Ces deux approximations nous permettent d'écrire l'équation (B.9), sous une forme reliant l'accroissement $\Delta\tilde{\sigma}$ de $\tilde{\sigma}$ entre t et $t + \Delta t$ à $\tilde{\sigma}(t)$. En effet, si l'on remplace dans (B.9) $\tilde{\rho}(t'')$ et $\tilde{\rho}(t)$ par (B.28) et qu'on divise les deux membres de l'équation par Δt , on obtient, comme le premier terme de (B.9) est nul, d'après (B.20) :

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' Tr_R[\tilde{V}(t''), \tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R] \quad (\text{B.30})$$

La vitesse de variation $\Delta\tilde{\sigma}/\Delta t$ est appelée « vitesse de variation à gros grains », car elle peut être considérée comme la moyenne temporelle de la vitesse instantanée $d\tilde{\sigma}/dt$ sur un intervalle Δt . En effet, $\Delta\tilde{\sigma}/\Delta t$ peut s'écrire

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}}{\Delta t} = \frac{\tilde{\sigma}(t + \Delta t) - \tilde{\sigma}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \frac{d\tilde{\sigma}}{dt'} \quad (\text{B.31})$$

Toutes les variations rapides de la vitesse instantanée se produisant à une échelle de temps inférieure à Δt sont lissées dans une telle moyenne. Le fait que $\Delta\tilde{\sigma}/\Delta t$ ne dépende que de l'état $\tilde{\sigma}(t)$ du système \mathcal{A} à l'instant t signifie que, examinée avec une résolution temporelle pas trop grande, l'évolution de \mathcal{A} ne dépend que du présent et non du passé (processus de Markov).

Comme, d'après (B.17) et (B.18), $\tilde{V}(t')$ et $\tilde{V}(t'')$ sont, comme $\tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R$, des produits d'observables de \mathcal{A} et de \mathcal{R} commutant entre elles, la trace sur \mathcal{R} de (B.30) ne porte que sur des produits de la forme $\sigma_R \tilde{R}(t') \tilde{R}(t'')$ ou $\sigma_R \tilde{R}(t'') \tilde{R}(t')$. Il apparaît ainsi que l'intégrale de (B.30) ne dépend du réservoir que par l'intermédiaire des moyennes à deux temps $g(\tau)$ ou $g(-\tau)$ introduites plus haut, avec $\tau = t' - t''$. Pour exploiter le fait que $g(\tau)$ décroît très vite avec τ , il est commode de changer de variables d'intégration dans (B.30) et de passer des variables t' et t'' aux variables τ et t' . La figure 1 montre le domaine d'intégration en t' et t'' de (B.30). C'est le triangle OAB . Les lignes d'égales valeurs de τ sont des parallèles à la première bissectrice OB , qui correspond à $\tau = 0$. Pour τ fixé, on peut intégrer sur t' de $t + \tau$ à $t + \Delta t$, puis intégrer sur τ de 0 à Δt , ce qui donne

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' = \int_0^{\Delta t} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt' \quad (\text{B.32})$$

Comme les moyennes à deux temps du réservoir $g(\tau)$ et $g(-\tau)$ sont négligeables pour $\tau \gg \tau_c$, la seule région du domaine d'intégration où

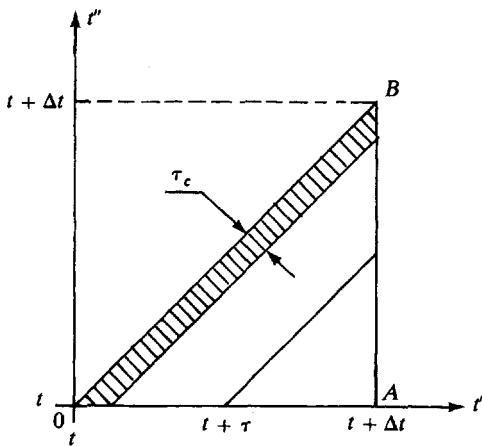


Figure 1. Domaine d'intégration en t' et t'' . La présence des moyennes à deux temps $g(\tau)$ et $g(-\tau)$ du réservoir entraîne que, seule, une bande de largeur τ_c au voisinage de $0B$ contribue (zone hachurée).

l'intégrand est non nul est une bande étroite, de largeur de l'ordre de τ_c , au voisinage de $0B$ (zone hachurée de la figure 1). Comme $\Delta t \gg \tau_c$, on commet une erreur négligeable si l'on étend à $+\infty$ la borne supérieure de l'intégrale en τ de (B.32) et à t la borne inférieure de l'intégrale sur t' . Finalement, après développement du double commutateur de (B.30), et utilisation de (B.17) et (B.22), il vient

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \tilde{\sigma}}{\Delta t} = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \times \\ & \times \{ g(\tau)[\tilde{A}(t')\tilde{A}(t'-\tau)\tilde{\sigma}(t) - \tilde{A}(t'-\tau)\tilde{\sigma}(t)\tilde{A}(t')] + \\ & + g(-\tau)[\tilde{\sigma}(t)\tilde{A}(t'-\tau)\tilde{A}(t') - \tilde{A}(t')\tilde{\sigma}(t)\tilde{A}(t'-\tau)] \} \quad (\text{B.33}) \end{aligned}$$

Pour aller plus loin et effectuer l'intégration sur t' , il convient maintenant de projeter l'équation opératorielle (B.33) sur une base d'états.

4. Equation pilote dans la base des états d'énergie du petit système

Soient $|a\rangle$ les états propres de H_A , de valeurs propres E_a

$$H_A |a\rangle = E_a |a\rangle \quad (\text{B.34})$$

L'équation (B.33) devient dans la base orthonormée $\{|a\rangle\}$

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}_{ab}}{\Delta t} = \sum_{cd} \gamma_{abcd}(t) \tilde{\sigma}_{cd}(t) \quad (\text{B.35})$$

avec

$$\begin{aligned} \gamma_{abcd}(t) = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \times \\ & \times \{ g(\tau) [\delta_{bd} \sum_n \tilde{A}_{an}(t') \tilde{A}_{nc}(t' - \tau) - \tilde{A}_{ac}(t' - \tau) \tilde{A}_{db}(t')] + \\ & + g(-\tau) [\delta_{ac} \sum_n \tilde{A}_{dn}(t' - \tau) \tilde{A}_{nb}(t') - \tilde{A}_{ac}(t') \tilde{A}_{db}(t' - \tau)] \} \quad (\text{B.36}) \end{aligned}$$

La dépendance en t' de l'intégrand de (B.36) ne peut provenir que des éléments de matrice $\tilde{A}_{an}(t')$, $\tilde{A}_{nc}(t' - \tau)$... qui varient en $\exp i\omega_{an}t'$, $\exp i\omega_{nc}(t' - \tau)$... où les ω_{an} , ω_{nc} ... sont les fréquences de Bohr de \mathcal{A}

$$\omega_{an} = \omega_a - \omega_n \quad (\text{B.37.a})$$

$$\omega_a = E_a/\hbar, \quad \omega_n = E_n/\hbar \quad (\text{B.37.b})$$

Il est facile alors de vérifier que tous les termes de l'accolade de (B.36) varient en $\exp i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t'$. Par exemple, la dépendance en t' du premier terme est, (compte tenu du δ_{bd} qui entraîne que $\omega_b = \omega_d$)

$$\begin{aligned} \exp i(\omega_a - \omega_n + \omega_n - \omega_c)t' &= \exp i(\omega_a - \omega_c)t' = \\ &= \exp i(\omega_a - \omega_b + \omega_d - \omega_c)t' = \exp i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t' \quad (\text{B.38}) \end{aligned}$$

Celle du second terme est

$$\exp i(\omega_a - \omega_c + \omega_d - \omega_b)t' = \exp i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t' \quad (\text{B.39})$$

des démonstrations analogues pouvant être faites pour les troisième et quatrième termes. Il s'ensuit que l'intégrale sur t' de (B.36) peut être faite aisément et donne

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' e^{i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t'} = e^{i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t} f[(\omega_{ab} - \omega_{cd})\Delta t] \quad (\text{B.40})$$

où

$$f(x) = e^{ix/2} \frac{\sin(x/2)}{(x/2)} \quad (\text{B.41})$$

Si $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$, la valeur de f dans (B.40) est pratiquement égale à 1. Par contre, si $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \gg 1/\Delta t$, elle est pratiquement nulle. Il est donc tout à fait légitime de négliger les couplages entre

$\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ et $\tilde{\sigma}_{cd}$ si $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \gg 1/\Delta t$. Enfin, si $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \sim 1/\Delta t$, nous verrons plus loin que la condition $T_R \gg \Delta t$ entraîne que le couplage entre $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ et $\tilde{\sigma}_{cd}$ a des effets très faibles. Nous les négligerons et ne garderons donc que les termes couplant $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ à $\tilde{\sigma}_{cd}$ avec $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$, termes dits « séculaires » et pour lesquels $f = 1$. Finalement, avec cette « approximation séculaire », l'équation pilote (B.35) devient

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}_{ab}}{\Delta t} = \sum_{c,d}^{(\text{sec})} e^{i(\omega_{ab} - \omega_{cd})t} \mathcal{R}_{abcd} \tilde{\sigma}_{cd}(t) \quad (\text{B.42})$$

où $\sum_{c,d}^{(\text{sec})}$ signifie que la somme est restreinte aux états c,d tels que $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$, et où les \mathcal{R}_{abcd} sont des coefficients indépendants de t et Δt et qui sont donnés par l'intégrale sur τ de (B.36)

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{abcd} = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \times \\ & \times \{ g(\tau) [\delta_{bd} \sum_n A_{an} A_{nc} e^{i\omega_{cn}\tau} - A_{ac} A_{db} e^{i\omega_{ca}\tau}] + \\ & + g(-\tau) [\delta_{ac} \sum_n A_{dn} A_{nb} e^{i\omega_{nd}\tau} - A_{ac} A_{db} e^{i\omega_{bd}\tau}] \} \quad (\text{B.43}) \end{aligned}$$

Avant de calculer les coefficients \mathcal{R}_{abcd} de l'équation pilote et de les interpréter physiquement, il nous faut encore repasser de la représentation d'interaction au point de vue de Schrödinger, où l'opérateur densité de \mathcal{A} est $\sigma(t)$. La relation

$$\sigma_{ab}(t) = e^{-i\omega_{ab}t} \tilde{\sigma}_{ab}(t) \quad (\text{B.44})$$

entre les éléments de matrice de $\sigma(t)$ et $\tilde{\sigma}(t)$ entraîne la relation

$$\frac{d\sigma_{ab}(t)}{dt} = -i\omega_{ab} \sigma_{ab}(t) + e^{-i\omega_{ab}t} \frac{d\tilde{\sigma}_{ab}(t)}{dt} \quad (\text{B.45})$$

entre les vitesses instantanées de σ_{ab} et $\tilde{\sigma}_{ab}$. Approximons la vitesse instantanée $d\tilde{\sigma}_{ab}/dt$ apparaissant en (B.45) par la vitesse de variation à gros grains $\Delta\tilde{\sigma}_{ab}/\Delta t$ calculée en (B.42). Nous obtenons alors, compte tenu de (B.44)

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ab}(t) = -i\omega_{ab} \sigma_{ab}(t) + \sum_{c,d}^{(\text{sec})} \mathcal{R}_{abcd} \sigma_{cd}(t) \quad (\text{B.46})$$

L'exponentielle figurant dans (B.42) a disparu. Dans le point de vue de Schrödinger, l'équation pilote, développée dans la base des états propres de H_A , a la structure d'un *système différentiel linéaire à coefficients constants*.

Le premier terme du second membre de (B.46) décrit l'évolution libre de σ_{ab} , le second l'effet du couplage avec \mathcal{R} . Les coefficients \mathcal{R}_{abcd} sont donc de l'ordre de $1/T_R$, où T_R est le temps d'évolution de \mathcal{R} . Si les éléments de matrice σ_{ab} et σ_{cd} ont des fréquences propres ω_{ab} et ω_{cd} suffisamment différentes, c'est-à-dire si $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \gg 1/T_R$, le couplage \mathcal{R}_{abcd} entre eux aura des effets très faibles (de la même manière qu'en mécanique quantique, un couplage V_{ab} entre deux niveaux d'énergie E_a et E_b a des effets très faibles, au second ordre en V , si $|E_a - E_b| \gg V_{ab}$). Comme $T_R \gg \Delta t$ (voir (B.29)), la condition $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \sim 1/\Delta t$ correspond bien à $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \gg 1/T_R$. Il était donc légitime de négliger dans (B.42) les couplages entre σ_{ab} et σ_{cd} quand $|\omega_{ab} - \omega_{cd}|$ n'est pas très petit devant $1/\Delta t$.

C - CONTENU PHYSIQUE DE L'ÉQUATION PILOTE

1. Evolution des populations

Les populations σ_{aa} des niveaux d'énergie $|a\rangle$ de \mathcal{A} ont toutes la même fréquence d'évolution libre ($\omega_{aa} = 0$). Les termes de couplage qui existent entre elles sont donc tous des termes séculaires. Nous supposerons de plus qu'il n'existe pas de cohérence σ_{cd} de fréquence d'évolution libre très basse ($|\omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$). Les populations ne sont donc couplées qu'entre elles, l'équation (B.46) s'écrivant

$$\frac{d\sigma_{aa}}{dt} = \sum_c \mathcal{R}_{aacc} \sigma_{cc} \quad (\text{C.1})$$

Pour calculer \mathcal{R}_{aacc} , nous faisons $b = a$ et $d = c$ dans (B.43). Supposons tout d'abord $c \neq a$. Les deux symboles de Kronecker δ_{bd} et δ_{ac} sont alors nuls. Les deux termes restant dans l'accolade de (B.43) sont complexes conjugués l'un de l'autre (voir (B.26)) et se regroupent pour donner

$$\mathcal{R}_{aacc} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau g(\tau) |A_{ac}|^2 e^{i\omega_{ca}\tau} \quad (\text{C.2})$$

Remplaçons alors $g(\tau)$ par son expression (B.23). Il vient

$$\mathcal{R}_{aacc} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_{\mu\nu} + \omega_{ca})\tau} |A_{ac}|^2 |R_{\mu\nu}|^2 \quad (\text{C.3})$$

L'intégrale sur τ est immédiate et donne $2\pi\delta(\omega_{\mu\nu} + \omega_{ca})$ qui s'écrit encore, compte tenu de (B.25) et (B.37), $2\pi\hbar\delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a)$. Par ailleurs, $|A_{ac}|^2 |R_{\mu\nu}|^2$ est égal, d'après (B.16), à $|\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|^2$. Finalement, en posant

$$\mathcal{R}_{aacc} = \Gamma_{c \rightarrow a} \quad (\text{C.4})$$

nous obtenons pour $\Gamma_{c \rightarrow a}$

$$\Gamma_{c \rightarrow a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} |\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|^2 \delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a) \quad (\text{C.5})$$

L'interprétation physique de $\Gamma_{c \rightarrow a}$ est très claire. $\Gamma_{c \rightarrow a}$ est la probabilité par unité de temps pour que le système \mathcal{A} effectue, sous l'effet du couplage avec \mathcal{R} , une transition du niveau c vers le niveau a (Figure 2). En effet, une telle transition correspond, pour le système global $\mathcal{A} + \mathcal{R}$, à une transition $|\mu, c\rangle \rightarrow |\nu, a\rangle$. L'équation (C.5) donne la probabilité par unité de temps de cette transition (en accord

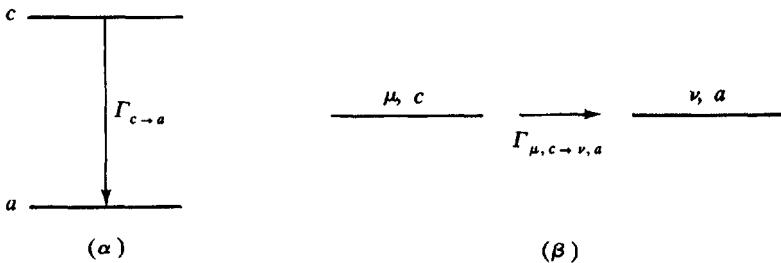


Figure 2. Probabilité de transition par unité de temps entre les états c et a de \mathcal{A} (Fig. α) et les états μ, c et ν, a de $\mathcal{A} + \mathcal{R}$ (Fig. β). $\Gamma_{c \rightarrow a}$ s'obtient à partir de $\Gamma_{\mu, c \rightarrow \nu, a}$ par une moyenne sur μ et une somme sur ν .

avec la règle d'or de Fermi), moyennée sur tous les états initiaux μ possibles du réservoir (pondérés par p_μ) et sommée sur tous les états finals ν du réservoir, la fonction delta exprimant la conservation de l'énergie globale de $\mathcal{A} + \mathcal{R}$.

Il reste à évaluer \mathcal{R}_{aaaa} . Ce sont maintenant les second et quatrième termes de l'accolade de (B.43) qui s'annulent avec les termes $n = a$ des première et troisième sommes. Les termes restant $n \neq a$ font apparaître $\Gamma_{a \rightarrow n}$ et l'on obtient

$$\mathcal{R}_{aaaa} = - \sum_{n \neq a} \Gamma_{a \rightarrow n} \quad (\text{C.6})$$

Finalement, l'équation pilote pour les populations (C.1) s'écrit

$$\frac{d\sigma_{aa}}{dt} = - \sigma_{aa} \sum_{n \neq a} \Gamma_{a \rightarrow n} + \sum_{c \neq a} \sigma_{cc} \Gamma_{c \rightarrow a} \quad (\text{C.7.a})$$

ou encore

$$\frac{d\sigma_{aa}}{dt} = \sum_{c \neq a} (\sigma_{cc} \Gamma_{c \rightarrow a} - \sigma_{aa} \Gamma_{a \rightarrow c}) \quad (\text{C.7.b})$$

L'équation (C.7.a) exprime que la population σ_{aa} de \mathcal{A} diminue par suite des transitions effectuées de a vers les autres niveaux n , et croît par suite des transitions effectuées des autres niveaux c vers le niveau a . L'écriture sous la forme (C.7.b) montre le bilan des transferts qui s'effectuent entre une paire de niveaux c et a et permet d'établir simplement que

$$\sum_a \frac{d}{dt} \sigma_{aa} = 0 \quad (\text{C.8})$$

(conservation de la normalisation de σ au cours du temps)

Remarques

(i) Le plus souvent, la solution stationnaire des équations (C.7.b) correspond à

$$\sigma_{aa}^{st} \Gamma_{a \rightarrow c} = \sigma_{cc}^{st} \Gamma_{c \rightarrow a} \quad (\text{C.9})$$

La condition (C.9), dite de « bilan détaillé », exprime qu'en régime stationnaire et pour toute paire de niveaux a et c , le nombre de transitions de a vers c compense celui de c vers a .

(ii) Si le réservoir \mathcal{R} est en équilibre thermodynamique à la température T , c'est-à-dire si les populations p_μ des niveaux μ de \mathcal{R} sont données par (B.15), on peut montrer à partir de (C.5) (voir exercice 16) que

$$e^{-E_a/k_B T} \Gamma_{a \rightarrow c} = e^{-E_c/k_B T} \Gamma_{c \rightarrow a} \quad (\text{C.10})$$

La comparaison de (C.9) et (C.10) montre alors que les populations σ_{aa} de \mathcal{A} tendent, sous l'effet du couplage avec \mathcal{R} , vers un état stationnaire où elles sont proportionnelles à $\exp(-E_a/k_B T)$. En interagissant avec un réservoir en équilibre thermodynamique, le système \mathcal{A} parvient donc lui aussi à un équilibre thermodynamique à la même température T .

2. Evolution des cohérences

Nous nous intéressons maintenant à l'évolution des éléments non diagonaux σ_{ab} de σ , et nous considérons d'abord le cas où la fréquence de Bohr ω_{ab} associée à la cohérence σ_{ab} est non dégénérée, c'est-à-dire le cas où il n'y a pas d'autres fréquences de Bohr ω_{cd} différent de ω_{ab} d'une quantité inférieure à $1/\Delta t$. Le seul terme séculaire est donc celui couplant la cohérence σ_{ab} à elle-même, et l'équation (B.46) s'écrit

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ab} = -i\omega_{ab} \sigma_{ab} + \mathcal{R}_{abab} \sigma_{ab} \quad (\text{C.11})$$

Pour calculer \mathcal{R}_{abab} , faisons $c = a$, $d = b$ dans (B.43). Il vient

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{abab} = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \left\{ g(\tau) \left[\sum_n |A_{an}|^2 e^{i\omega_{an}\tau} - A_{aa} A_{bb} \right] + \right. \\ & \left. + g(-\tau) \left[\sum_n |A_{bn}|^2 e^{-i\omega_{bn}\tau} - A_{aa} A_{bb} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Il faut ensuite remplacer $g(\tau)$ par (B.23), $g(-\tau)$ par $g(\tau)^*$, évaluer les intégrales de $\tau = 0$ à $\tau = \infty$ des exponentielles, ce qui fait apparaître des parties principales et des fonctions delta. On obtient ainsi

$$\mathcal{R}_{abab} = -\Gamma_{ab} - i\Delta_{ab} \quad (\text{C.13})$$

où Δ_{ab} et Γ_{ab} sont des grandeurs réelles données par

$$\Delta_{ab} = \Delta_a - \Delta_b \quad (\text{C.14})$$

avec

$$\Delta_a = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \sum_{n} \frac{|\langle \nu, n | V | \mu, a \rangle|^2}{E_{\mu} + E_a - E_{\nu} - E_n} \quad (\text{C.15})$$

et une expression analogue pour Δ_b , et où

$$\Gamma_{ab} = \Gamma_{ab}^{\text{non ad.}} + \Gamma_{ab}^{\text{ad.}} \quad (\text{C.16})$$

avec

$$\Gamma_{ab}^{\text{non ad.}} = \frac{1}{2} \left(\sum_{n \neq a} \Gamma_{a \rightarrow n} + \sum_{n \neq b} \Gamma_{b \rightarrow n} \right) \quad (\text{C.17})$$

et

$$\begin{aligned} \Gamma_{ab}^{\text{ad.}} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \delta(E_{\mu} - E_{\nu}) \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{2} |\langle \nu, a | V | \mu, a \rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle \mu, b | V | \nu, b \rangle|^2 - \right. \\ & \left. - \Re \langle \mu, a | V | \nu, a \rangle \langle \nu, b | V | \mu, b \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

La quantité $\hbar\Delta_{ab}$ représente un *déplacement*, au second ordre en V , de la fréquence ω_{ab} , dû au couplage entre \mathcal{A} et \mathcal{R} . Il apparaît en effet sur (C.15) que $\hbar\Delta_a$ est le déplacement de l'état $|\mu, a\rangle$ du système global $\mathcal{A} + \mathcal{R}$, pondéré par la probabilité d'occupation p_{μ} du niveau μ du réservoir et sommé sur μ . $\hbar\Delta_a$ peut donc être considéré comme le déplacement énergétique moyen de l'état $|a\rangle$ de \mathcal{A} .

La quantité Γ_{ab} représente un taux *d'amortissement* de la cohérence σ_{ab} dû au couplage entre \mathcal{A} et \mathcal{R} . La première contribution à Γ_{ab} , écrite en (C.17), représente des effets « non adiabatiques » puisque l'expression (C.17) est la demi-somme des probabilités par unité de temps qu'a le système de quitter l'état a ou l'état b . Un processus arrachant le système de l'état a ou de l'état b perturbe en effet l'oscillation de toute grandeur physique sensible à σ_{ab} . La deuxième contribution, écrite en (C.18), est dite « adiabatique » car elle est due à des processus où \mathcal{A} ne change pas d'état tout en interagissant avec \mathcal{R} qui passe d'un état μ à un état ν de même énergie que μ .

Il nous reste enfin à considérer le cas où la fréquence ω_{ab} est dégénérée. Il faut alors, comme dans l'équation (B.46), tenir compte des couplages entre la cohérence σ_{ab} et les autres cohérences σ_{cd} telles que $|\omega_{cd} - \omega_{ab}| \ll 1/\Delta t$. Le calcul de \mathcal{R}_{abcd} à partir de (B.43)

(avec $c \neq a, b \neq d$, $|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll 1/\Delta t$) donne alors

$$\mathcal{R}_{abcd} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \langle \nu, a | V | \mu, c \rangle \langle \mu, d | V | \nu, b \rangle \times \delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a) \quad (\text{C.19})$$

Les couplages entre cohérences différentes de même fréquence de Bohr sont importants pour comprendre le déplacement et l'élargissement des transitions de systèmes ayant des niveaux équidistants comme l'oscillateur harmonique ou l'atome habillé.

Remarque

Toutes les expressions établies dans cette partie et reliant les paramètres physiques comme Γ_{b-a} , Δ_a , $\Gamma_{ab}^{\text{ad.}}$, $\Gamma_{ab}^{\text{non ad.}}$, \mathcal{R}_{abcd} ... à des éléments de matrice de V demeurant valables quand V , au lieu d'être de la forme $V = -AR$, s'écrit $V = - \sum_p A_p R_p$.

D - DISCUSSION DES APPROXIMATIONS

Pour préciser les conditions de validité du traitement présenté dans la partie B ci-dessus, il nous faut tout d'abord évaluer un ordre de grandeur du temps d'évolution T_R du système \mathcal{A} .

1. Ordre de grandeur du temps d'évolution de \mathcal{A}

Revenons à l'équation (B.30) et essayons d'évaluer un ordre de grandeur du second membre. Nous avons vu plus haut (fin du paragraphe B-3) que la seule partie du domaine d'intégration de la figure 1 qui contribue de manière significative à l'intégrale est une bande de largeur τ_c au voisinage de la première bissectrice OB . Sur cette bissectrice, $t' = t''$, et l'intégrand de (B.30) est de l'ordre de $\langle V^2 \rangle_R \tilde{\sigma}(t)$ où

$$\langle V^2 \rangle_R = Tr_R \tilde{\sigma}_R \tilde{V}(t')^2 = Tr_R \sigma_R V^2 \quad (D.1)$$

L'ordre de grandeur du second membre de (B.30) est donc obtenu en multipliant (D.1) par $1/\hbar^2 \Delta t$ fois la surface de la zone hachurée de la figure 1 qui est de l'ordre de $\tau_c \Delta t$

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}}{\Delta t} \sim -\frac{\tau_c}{\hbar^2} \langle V^2 \rangle_R \tilde{\sigma} \quad (D.2)$$

Désignons par v^2 l'ordre de grandeur de $\langle V^2 \rangle_R$. Le paramètre v caractérise l'intensité du couplage entre \mathcal{A} entre \mathcal{B} . Comme le coefficient multipliant $\tilde{\sigma}$ au second membre de (D.2) est de l'ordre de l'inverse du temps d'évolution T_R de \mathcal{A} , nous obtenons pour $1/T_R$ l'ordre de grandeur

$$\frac{1}{T_R} \sim \frac{v^2 \tau_c}{\hbar^2} \quad (D.3)$$

2. Condition d'existence de deux échelles de temps

La condition $\tau_c \ll T_R$, sur laquelle repose tout le traitement de la partie B ci-dessus, s'écrit, compte tenu de (D.3)

$$\frac{v \tau_c}{\hbar} \ll 1 \quad (D.4)$$

L'équation (D.4) exprime que l'évolution due au couplage V entre \mathcal{A} et \mathcal{B} , caractérisée par la fréquence v/\hbar , a un effet très faible pendant

le temps de corrélation τ_c (analogie avec les collisions faibles du mouvement brownien qui changent très peu la vitesse de la particule lourde pendant le temps de collision τ_c).

Le paramètre v introduit plus haut caractérise également la dispersion des valeurs de V . Si l'élargissement des raies de \mathcal{A} produit par le couplage avec \mathcal{R} était inhomogène, la largeur des raies serait de l'ordre de v/\hbar . Or, d'après (D.2), cette largeur est de l'ordre de $1/T_R$, c'est-à-dire encore d'après (D.3) et (D.4), de l'ordre de

$$\frac{v}{\hbar} \frac{v\tau_c}{\hbar} \ll \frac{v}{\hbar} \quad (\text{D.5})$$

Le fait que l'interaction entre \mathcal{A} et \mathcal{R} fluctue rapidement réduit donc la largeur inhomogène v/\hbar par un facteur $v\tau_c/\hbar \ll 1$, d'où le nom de condition de « rétrécissement par le mouvement » donné à (D.4).

3. Condition de validité du développement perturbatif

Si l'on itérait l'équation (B.5) au-delà du second ordre (tout en remplaçant partout $\tilde{\rho}(t)$ par (B.28)), on obtiendrait au second membre de (B.30), en plus du double commutateur qui y figure déjà, un triple commutateur, un quadruple commutateur...

La même démarche que celle suivie dans le paragraphe D-1 plus haut peut être utilisée pour évaluer l'ordre de grandeur des contributions de ces termes d'ordre supérieur en V . Par exemple, le triple commutateur fait intervenir l'intégrale sur t_1, t_2, t_3 d'un produit de trois opérateurs $\tilde{V}(t_1) \tilde{V}(t_2) \tilde{V}(t_3)$ et de σ_R . Comme les trois temps t_1, t_2, t_3 doivent être très proches les uns des autres (à τ_c près), le volume utile du domaine d'intégration est de l'ordre de $\tau_c^2 \Delta t$, de sorte que l'ordre de grandeur du terme d'ordre 3 en V est

$$\frac{v^3}{\hbar^3} \tau_c^2 = \frac{v^2 \tau_c}{\hbar^2} \frac{v \tau_c}{\hbar} \sim \frac{1}{T_R} \frac{v \tau_c}{\hbar}, \quad (\text{D.6})$$

soit $v\tau_c/\hbar$ fois le terme d'ordre 2. Il apparaît ainsi que l'infiniment petit $v\tau_c/\hbar$ caractérise aussi le développement de perturbation. Si la condition (D.4) est remplie, il est légitime d'arrêter un tel développement à l'ordre 2 en V .

4. Factorisation de l'opérateur densité global à l'instant t

Examinons enfin l'approximation consistant à négliger $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t)$ dans (B.27). Supposons que les corrélations (décrisées par $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t)$) qui existent entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t résultent des interactions qui se sont

produites entre \mathcal{A} et \mathcal{R} dans le passé de t . Ceci revient à supposer qu'à un instant initial donné t_0 , dans le passé de t , \mathcal{A} et \mathcal{R} ne sont pas corrélés (\mathcal{A} et \mathcal{R} sont par exemple mis en contact l'un avec l'autre à t_0). A l'ordre le plus bas en V , il faut au moins une interaction \tilde{V} dans le passé de t pour avoir $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t) \neq 0$. Si nous considérons maintenant que $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t)$ est non nul, la contribution à $\Delta\tilde{\sigma}(t)$ du terme d'ordre 1 en V de (B.9) n'est plus nulle. En effet, si l'on ne néglige pas $\tilde{\rho}_{\text{correl}}(t)$ dans ce terme, il n'est plus possible d'utiliser (B.20) et d'obtenir un résultat nul pour ce terme. Ainsi, à l'ordre 2 en V , une nouvelle contribution à $\Delta\tilde{\sigma}(t)$ apparaît, provenant d'une interaction dans le passé de t (qui crée des corrélations entre \mathcal{A} et \mathcal{R}), et d'une autre interaction dans l'intervalle $[t, t + \Delta t]$ (qui produit une variation $\Delta\tilde{\sigma}$ de $\tilde{\sigma}$ à partir de ces corrélations).

L'ordre de grandeur de cette contribution que nous avons négligée est

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}}{\Delta t} \sim -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_{-\infty}^t dt'' \int_t^{t+\Delta t} dt' \langle \tilde{V}(t'') \tilde{V}(t') \rangle_R \tilde{\sigma} \quad (\text{D.7})$$

t'' variant dans le passé de t et t' dans l'intervalle $[t, t + \Delta t]$. Comme $\langle \tilde{V}(t') \tilde{V}(t'') \rangle_R$ est nul dès que $t' - t'' \gg \tau_c$, le domaine d'intégration se réduit à deux intervalles de largeur τ_c de part et d'autre de t , et l'ordre de grandeur du taux de variation associé à (D.7) est

$$\frac{v^2 \tau_c^2}{\hbar^2 \Delta t} = \frac{v^2 \tau_c}{\hbar^2} \frac{\tau_c}{\Delta t} = \frac{1}{T_R} \frac{\tau_c}{\Delta t} \quad (\text{D.8})$$

Il apparaît ainsi, comme nous l'avons annoncé plus haut (voir discussion avant (B.28)), que la contribution du dernier terme de (B.27) est plus petite que celle du premier par un facteur $\tau_c/\Delta t$. Comme nous avons pris $\Delta t \gg \tau_c$, il est tout à fait légitime de négliger une telle contribution.

Ainsi, les corrélations initiales entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t n'influent sur le futur de $\tilde{\sigma}$ que dans l'intervalle $[t, t + \tau_c]$, alors que des nouvelles corrélations s'établissent en permanence dans l'intervalle $[t, t + \Delta t]$ et font évoluer $\tilde{\sigma}$ proportionnellement à Δt .

Remarque

Il est possible d'imaginer des corrélations entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t dont l'effet sur l'évolution ultérieure de \mathcal{A} peut être spectaculaire. Considérons par exemple, à l'instant $t_0 = 0$, un atome initialement excité dans l'état $|b\rangle$, sans aucun photon incident. Laissons la désintégration radiative se dérouler entre 0 et t . Puis, imaginons qu'à l'instant t , on applique sur l'état $|\psi(t)\rangle$ du système global atome + rayonnement l'opérateur de renversement du sens du temps K . Comme l'équation de Schrödinger possède la symétrie de renversement du sens du temps, nous savons qu'à l'instant $2t$, l'atome sera revenu dans l'état excité (plus

exactement dans l'état $K|b\rangle$), dans le vide de rayonnement. Il est clair ainsi que l'état $K|\psi(t)\rangle$ présente des corrélations très particulières puisque l'évolution à partir de cet état n'a pas du tout le comportement irréversible prédit par l'équation pilote. Une telle équation ne peut donc être toujours valable, même si \mathcal{R} est un réservoir. Il ne faut pas perdre de vue cependant que les corrélations du type de celles contenues dans l'état $K|\psi(t)\rangle$ sont très particulières et extrêmement difficiles à réaliser concrètement, dans une expérience. Nous excluons donc de notre traitement toute situation de ce type.

5. Récapitulation

Finalement, la condition de validité du traitement présenté dans la partie B est la condition de rétrécissement par le mouvement (D.4). Une telle condition permet de définir deux échelles de temps bien distinctes T_R et τ_c , et de faire un calcul perturbatif de la variation $\Delta\tilde{\sigma}$ de $\tilde{\sigma}$ dans l'intervalle $[t, t + \Delta t]$ avec $\tau_c \ll \Delta t \ll T_R$. Il n'est pas nécessaire alors de tenir compte des corrélations initiales entre \mathcal{A} et \mathcal{R} à l'instant t , résultant des interactions entre \mathcal{A} et \mathcal{R} dans le passé de t . Le fait que la vitesse de variation à gros grains $\Delta\sigma/\Delta t$ soit donnée (dans le point de vue de Schrödinger) par un système différentiel linéaire à coefficients constants entraîne que la démarche précédente est valable pour tout t . L'équation pilote peut donc être utilisée pour comprendre l'évolution de $\tilde{\sigma}$ sur des temps beaucoup plus longs, de l'ordre de quelques T_R . Le résultat remarquable d'une telle approche est qu'une étude perturbative de l'évolution du système sur un intervalle de temps court ($\Delta t \ll T_R$), mais pas trop court ($\Delta t \gg \tau_c$), permet de prédire son comportement sur des temps beaucoup plus longs. En ce sens, une telle approche est non perturbative et rappelle la démarche du chapitre III où un calcul perturbatif de l'opérateur déplacement permet d'obtenir des expressions non perturbatives pour les amplitudes de transition.

E - APPLICATION À UN ATOME À DEUX NIVEAUX COUPLÉ AU RAYONNEMENT

Dans cette dernière partie, les notions précédentes sont illustrées sur un exemple simple. Nous établissons et discutons l'équation pilote décrivant l'évolution de la matrice densité d'un atome à deux niveaux a et b sous l'effet des processus d'émission spontanée, d'absorption et d'émission induite. L'atome est supposé tout d'abord infiniment lourd et immobile, ce qui permet d'étudier l'évolution des seuls degrés de liberté internes (§ 1). Les degrés de liberté de translation du centre de masse sont ensuite pris en compte, et nous étudions l'évolution des vitesses atomiques sous l'effet des échanges d'impulsion entre l'atome et un rayonnement incident (§ 2).

1. Evolution des degrés de liberté internes

Les électrons atomiques sont supposés évoluer autour d'un point fixe $\mathbf{0}$. Dans le point de vue dipolaire électrique, l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le rayonnement s'écrit (voir formule (91) de l'appendice)

$$V = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) = - i \mathbf{d} \cdot \sum_i \sqrt{\frac{\hbar \omega_i}{2 \epsilon_0 L^3}} \mathbf{e}_i (a_i - a_i^\dagger) \quad (\text{E.1})$$

où \mathbf{d} est le moment dipolaire électrique et où l'opérateur champ est évalué au point $\mathbf{0}$.

a) EQUATION PILOTE DÉCRIVANT L'ÉMISSION SPONTANÉE D'UN ATOME À DEUX NIVEAUX

Commençons par supposer le rayonnement dans l'état vide

$$\sigma_R = |0\rangle \langle 0| \quad (\text{E.2})$$

Nous avons déjà expliqué plus haut (partie A) pourquoi il était légitime de considérer le rayonnement dans un tel état comme un réservoir. Par ailleurs, l'état (E.2) satisfait bien aux conditions (B.12) et (B.20), compte tenu de l'expression (E.1) de V .

L'émission spontanée d'un photon à partir de l'état inférieur a ne peut conserver l'énergie globale non perturbée. L'équation (C.5) entraîne donc que

$$\Gamma_{a \rightarrow b} = 0 \quad (\text{E.3})$$

Par contre, la même équation donne un résultat non nul pour $\Gamma_{b \rightarrow a}$

$$\Gamma_{b \rightarrow a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |\langle a; \mathbf{k}\epsilon | V | b; 0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{ba}) \quad (\text{E.4.a})$$

qui n'est autre que la probabilité par unité de temps d'émission spontanée d'un photon Γ , déjà introduite dans le chapitre II et égale à l'inverse de la durée de vie radiative τ du niveau b

$$\Gamma_{b \rightarrow a} = \Gamma = \frac{1}{\tau} \quad (\text{E.4.b})$$

Les équations (C.7) pour les populations s'écrivent donc ici

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \sigma_{bb} = -\Gamma \sigma_{bb} \\ \frac{d}{dt} \sigma_{aa} = +\Gamma \sigma_{bb} \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

et ont bien la forme des équations (A.1) d'Einstein (avec $u(\omega) = 0$).

Considérons maintenant l'évolution de l'élément non diagonal σ_{ba} . Les résultats généraux du paragraphe C-2 ci-dessus donnent

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ba} = -i(\omega_{ba} + \Delta_{ba}) \sigma_{ba} - \frac{\Gamma}{2} \sigma_{ba} \quad (\text{E.6})$$

où $\hbar\Delta_{ba}$ est la différence des déplacements radiatifs des niveaux b et a

$$\Delta_{ba} = \Delta_b - \Delta_a \quad (\text{E.7.a})$$

$$\Delta_b = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle a; \mathbf{k}\epsilon | V | b; 0 \rangle|^2}{\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega} \quad (\text{E.7.b})$$

$$\Delta_a = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle b; \mathbf{k}\epsilon | V | a; 0 \rangle|^2}{-\hbar\omega_{ba} - \hbar\omega} \quad (\text{E.7.c})$$

et où $\Gamma/2$, qui est la demi-somme de (E.3) et (E.4.b), est la contribution non adiabatique à l'amortissement de σ_{ab} (voir (C.17)). La contribution adiabatique (C.18) est nulle car V n'a pas d'éléments diagonaux dans l'état $|a\rangle$ ou l'état $|b\rangle$ (d est impair et $|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont supposés avoir une parité bien définie).

Remarque

Il ne faut pas perdre de vue que l'approximation consistant à ne considérer que deux niveaux a et b de l'atome fait perdre de nombreux effets. Tout d'abord, même si a est le niveau fondamental et b le premier niveau excité, d'autres niveaux plus excités que b peuvent se désintégrer radiativement vers a ou b . Par ailleurs, la contribution des autres niveaux c de l'atome ne

peut certainement pas être négligée dans les processus non résonants (émission virtuelle et réabsorption d'un photon) qui sont à l'origine des déplacements radiatifs de a et b .

b) TERMES SUPPLÉMENTAIRES DÉCRIVANT L'ABSORPTION ET L'ÉMISSION INDUITE D'UN RAYONNEMENT À LARGE BANDE SPECTRALE ET FAIBLE INTENSITÉ

Nous supposons maintenant que des photons sont présents initialement, l'opérateur densité du rayonnement étant, d'après (B.14), un mélange statistique des états propres $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ de H_R , représentant n_1 photons dans le mode 1, ... n_i photons dans le mode $i \dots$, avec des poids $p(n_1 \dots n_i \dots)$

$$\sigma_R = \sum_{\{n_i\}} p(n_1 \dots n_i \dots) |n_1 \dots n_i \dots\rangle \langle n_1 \dots n_i \dots| \quad (\text{E.8})$$

Les conditions (B.12) et (B.20) sont toujours vérifiées. Nous avons expliqué plus haut (partie A), que si la largeur spectrale du rayonnement décrit par (E.8) est suffisamment grande et si son intensité est suffisamment faible, la condition $\tau_c \ll T_R$ est satisfaite, ce que nous supposons ici.

La probabilité de transition par unité de temps du niveau inférieur a au niveau supérieur b , calculée à partir de (C.5), n'est plus nulle lorsque (E.2) est remplacé par (E.8). Nous la noterons Γ' . Elle représente la probabilité par unité de temps d'absorption d'un photon à partir de a et vaut

$$\begin{aligned} \Gamma' = \Gamma_{a \rightarrow b} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\{n_i\}} p(n_1 \dots n_i \dots) \times \\ &\times \sum_{\{n'_i\}} |\langle b; n'_1 \dots n'_i \dots | V | a; n_1 \dots n_i \dots \rangle|^2 \delta(E_{\text{final}} - E_{\text{initial}}) \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

Comme V est proportionnel au champ E_\perp , et que E_\perp est une combinaison linéaire des a_i et a_i^+ (voir (E.1)), tous les n' doivent être égaux aux n , sauf un, n'_i qui doit être égal à $n_i \pm 1$. En fait, comme $E_b > E_a$, la conservation de l'énergie entraîne que seul $n'_i = n_i - 1$ est possible, de sorte que (E.9) se réécrit

$$\begin{aligned} \Gamma' = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n_1 \dots n_i \dots} &p(n_1 \dots n_i \dots) \times \\ &\times \sum_i |\langle b; n_1 \dots n_i - 1, \dots | V | a; n_1 \dots n_i \dots \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba}) \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Par ailleurs, comme $\langle n_i - 1 | a_i | n_i \rangle = \sqrt{n_i} \langle 0_i | a_i | 1_i \rangle$, Γ' peut encore s'écrire

$$\begin{aligned} \Gamma' &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \left(\sum_{\{n_i\}} n_i p(n_1, n_2 \dots n_i \dots) \right) \times \\ &\quad \times |\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba}) \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

ce qui fait apparaître le nombre moyen $\langle n_i \rangle$ de photons dans le mode i

$$\langle n_i \rangle = \sum_{\{n_i\}} n_i p(n_1, n_2 \dots n_i \dots) \quad (\text{E.12})$$

L'état du rayonnement n'intervient donc dans Γ' que par l'intermédiaire des nombres moyens de photons dans chaque mode. Enfin, la fonction $\delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba})$ exprimant la conservation de l'énergie dans (E.11) entraîne que seuls, les nombres moyens de photons des modes résonnantes interviennent. Γ' est donc proportionnel à l'intensité moyenne $I(\omega_{ba})$ du rayonnement incident à la fréquence atomique ω_{ba} .

Une démarche analogue peut être suivie pour le calcul de $\Gamma_{b \rightarrow a}$. Ce sont maintenant les éléments de matrice de a_i^+ entre $|b;n_1 \dots n_i \dots\rangle$ et $\langle a;n_1 \dots n_i + 1 \dots|$ qui interviennent et (E.11) doit être remplacé par

$$\Gamma_{b \rightarrow a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i (\langle n_i \rangle + 1) |\langle a;1_i | V | b;0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba}) \quad (\text{E.13})$$

On a utilisé la relation de normalisation des $p(n_1 \dots n_i \dots)$. La contribution du terme 1 de la parenthèse ($\langle n_i \rangle + 1$) de (E.13) redonne la probabilité de transition par unité de temps Γ déjà calculée plus haut et associée à l'émission spontanée de b vers a . Quant à l'autre terme $\langle n_i \rangle$, il redonne la probabilité de transition Γ' donnée en (E.11) de sorte que

$$\Gamma_{b \rightarrow a} = \Gamma + \Gamma' \quad (\text{E.14})$$

Finalement, les équations d'évolution (C.7) des populations deviennent, en présence de rayonnement incident

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \sigma_{bb} = -\Gamma \sigma_{bb} + \Gamma' (\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) \\ \frac{d}{dt} \sigma_{aa} = +\Gamma \sigma_{bb} + \Gamma' (\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) \end{cases} \quad (\text{E.15})$$

Elles ont bien la forme générale des équations (A.1) d'Einstein puisque Γ' est proportionnel à l'intensité lumineuse à la fréquence ω_{ba} et que, pour un atome à deux niveaux non dégénérés a et b , on peut montrer que $B_{a \rightarrow b} = B_{b \rightarrow a}$ dans (A.1).

Remarques

(i) Jusqu'ici nous n'avons fait aucune hypothèse sur la répartition angulaire et la polarisation du rayonnement incident. Si le rayonnement incident est isotrope et non polarisé, le nombre moyen de photons $\langle n_i \rangle$ dans un mode i (c'est-à-dire un mode $\mathbf{k}_i \epsilon_i$) ne dépend que de la fréquence ω_i de ce mode et non de $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_i/k_i$ et ϵ_i . La somme sur i de (E.11) est en fait une somme sur $\epsilon_i \perp \mathbf{k}_i$, suivie d'une intégrale angulaire sur \mathbf{k}_i et enfin d'une intégrale sur $k_i = |\mathbf{k}_i|$. Si $\langle n_i \rangle$ ne dépend que de ω_i , la somme sur ϵ_i et l'intégrale sur \mathbf{k}_i sont les mêmes dans les expressions (E.4.a) et (E.11) donnant Γ et Γ' . La différence entre Γ et Γ' n'apparaît que dans l'intégrale sur ω_i . Par suite de la fonction $\delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba})$ apparaissant dans (E.4.a) et (E.11), elle se réduit à un facteur multiplicatif $\langle n(\omega_{ba}) \rangle$ supplémentaire pour Γ' . Pour un rayonnement incident isotrope et non polarisé, on a donc

$$\Gamma' = \Gamma \langle n(\omega_{ba}) \rangle \quad (\text{E.16})$$

Γ' est donc égal à Γ que multiplie le nombre moyen de photons par mode résonnant.

(ii) Supposons maintenant que le rayonnement soit en équilibre thermodynamique à la température T . Un tel rayonnement est isotrope et non polarisé de sorte que (E.16) s'applique. De plus, on connaît dans ce cas la valeur de la probabilité $p(n_1 n_2 \dots n_i \dots)$ (voir (B.15)) et par suite, d'après (E.12), celle de $\langle n(\omega_{ba}) \rangle$ qui vaut (*)

$$\langle n(\omega_{ba}) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{ba}/k_B T} - 1} \quad (\text{E.17})$$

Reportons alors (E.16) dans la première équation (E.15), qui donne en régime stationnaire ($d\sigma_{bb}/dt = 0$)

$$\frac{\sigma_{bb}}{\sigma_{aa}} = \frac{\Gamma'}{\Gamma + \Gamma'} = \frac{\langle n(\omega_{ba}) \rangle}{1 + \langle n(\omega_{ba}) \rangle} \quad (\text{E.18})$$

Il suffit alors de reporter (E.17) dans (E.18) pour obtenir

$$\frac{\sigma_{bb}}{\sigma_{aa}} = e^{-\hbar\omega_{ba}/k_B T} = e^{-(E_b - E_a)/k_B T} \quad (\text{E.19})$$

Nous avons ainsi établi les équations d'Einstein à partir des premiers principes et montré qu'elles entraînent la mise en équilibre thermodynamique de l'atome.

(iii) Le nombre moyen de photons par mode pour un rayonnement isotrope, $\langle n(\omega) \rangle$, est directement relié à la densité d'énergie du rayonnement de fréquence ω , $u(\omega)$. Exprimons en effet de deux façons différentes la densité d'énergie dont la fréquence est comprise entre ω et $\omega + d\omega$. C'est d'une part $u(\omega)d\omega$, et c'est d'autre part l'énergie moyenne par mode

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 4 du complément D_{III} .

$\langle n(\omega) \rangle \hbar\omega$ divisée par le volume L^3 , multipliée par le nombre de modes dans la bande de fréquence comprise entre ω et $\omega + d\omega$, qui, compte tenu des deux polarisations possibles, vaut $8\pi k^2 dk / (2\pi/L)^3$. Il vient finalement :

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3 \langle n(\omega) \rangle}{\pi^2 c^3} \quad (\text{E.20})$$

Il nous reste à examiner la nouvelle équation d'évolution pour σ_{ba} , qui s'écrit

$$\frac{d}{dt} \sigma_{ba} = -i(\omega_{ba} + \Delta_{ba} + \Delta'_{ba})\sigma_{ba} - \frac{1}{2}(\Gamma + 2\Gamma')\sigma_{ba} \quad (\text{E.21})$$

Les termes nouveaux, affectés d'un indice prime, représentent, tout d'abord, un amortissement supplémentaire (en Γ') de σ_{ba} , associé au raccourcissement de la durée de vie des niveaux a et b par suite des processus d'absorption et d'émission stimulée ; ensuite, un déplacement supplémentaire Δ'_{ba} de la raie $b \leftrightarrow a$

$$\Delta'_{ba} = \Delta'_b - \Delta'_a \quad (\text{E.22})$$

associé aux déplacements lumineux des niveaux a et b produits par l'irradiation lumineuse. Par exemple, Δ'_a est donné par

$$\begin{aligned} \hbar\Delta'_a &= \mathcal{P} \sum_{n_1 \dots n_i \dots} p(n_1 \dots n_i \dots) \times \\ &\times \sum_i \frac{|\langle b; n_1 \dots n_i - 1 \dots | V |a; n_1 \dots n_i \dots \rangle|^2}{\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba}} \end{aligned} \quad (\text{E.23.a})$$

Un calcul analogue à celui effectué sur (E.10) permet de montrer que Δ'_a est proportionnel à

$$\Delta'_a \sim \mathcal{P} \int \frac{I(\omega) d\omega}{\omega - \omega_{ba}} \quad (\text{E.23.b})$$

et peut être appréciable si le profil excitateur $I(\omega)$ est quasirésonnant, tout en restant dissymétrique par rapport à ω_{ba} . Nous avons ainsi justifié de manière précise les considérations qualitatives du paragraphe E-2 du chapitre II sur le déplacement et l'élargissement des niveaux d'un atome produits par une irradiation lumineuse.

Remarques

- (i) Le traitement précédent peut être généralisé au cas où les niveaux a et b contiennent chacun plusieurs sous niveaux Zeeman. L'équation pilote permet alors de décrire quantitativement les transferts de populations entre sous niveaux Zeeman de a par des cycles absorption-émission

spontanée ou absorption-émission induite (méthode du « pompage optique ») ainsi que l'évolution des diverses « cohérences hertziennes ou optiques » entre paires de sous niveaux Zeeman appartenant au même niveau a ou b , ou aux deux (*).

(ii) Nous n'avons tenu compte dans (E.23) que des processus où un photon est virtuellement absorbé à partir de a puis réémis. En fait, un photon peut être également émis virtuellement à partir de a puis réabsorbé, ce qui conduit à une expression analogue à (E.23.a) où la quantité figurant dans \sum_i est remplacée par

$$\frac{|\langle b; n_1 \cdots n_i + 1 \cdots | V | a; n_1 \cdots n_i \cdots \rangle|^2}{-\hbar\omega_i - \hbar\omega_{ba}} \quad (\text{E.24})$$

Le terme indépendant de n_i dans (E.24) donne le déplacement radiatif Δ_a de l'état a [voir (E.7.c)]. Quant au terme proportionnel à n_i , il donne une contribution analogue à (E.23), au remplacement près de $\omega - \omega_{ba}$ par $-\omega - \omega_{ba}$ au dénominateur (ce qui montre que cette dernière correction à Δ'_a est très faible lorsque l'excitation est quasi résonante). Une expression plus correcte de Δ'_a est donc

$$\Delta'_a \sim \mathcal{P} \int d\omega I(\omega) \left[\frac{1}{\omega - \omega_{ba}} + \frac{1}{-\omega - \omega_{ba}} \right] = 2\omega_{ba} \mathcal{P} \int \frac{I(\omega)d\omega}{\omega^2 - \omega_{ba}^2} \quad (\text{E.25})$$

Pour un atome réel, il faudrait tenir compte également de l'excitation virtuelle de toutes les autres transitions $a \rightarrow c$ partant de a .

2. Evolution des vitesses atomiques

Le but de ce dernier paragraphe est d'obtenir une équation pilote décrivant comment la fonction de distribution des vitesses atomiques évolue sous l'effet des échanges d'impulsion entre atome et rayonnement.

L'atome est toujours schématisé par un système à deux niveaux a et b . Mais nous tenons compte maintenant du mouvement de son centre de masse, dont la position est notée \mathbf{R} et l'impulsion \mathbf{P} . Les fonctions propres de l'hamiltonien $\mathbf{P}^2/2M$ du centre de masse (où M est la masse de l'atome) sont des ondes planes auxquelles on impose des conditions aux limites périodiques dans une boîte cubique de côté L (comme pour les modes du champ de rayonnement). Elles s'écrivent

$$\varphi_p(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar) \quad (\text{E.26})$$

(*) Voir par exemple Cohen-Tannoudji.

L'atome interagit avec un champ de rayonnement homogène, isotrope et non polarisé, dont la largeur spectrale est suffisamment grande et l'intensité suffisamment faible pour qu'il soit possible d'écrire une équation pilote pour l'atome.

Nous commençons (§ a) par généraliser les équations (E.15) et par établir des équations décrivant l'évolution couplée des degrés de liberté internes et de translation. Nous montrons ensuite qu'il est possible dans certaines conditions d'éliminer les variables internes et d'obtenir une équation de Fokker-Planck pour la fonction de distribution des vitesses atomiques (§ b). Nous discutons enfin le contenu physique de cette équation (§§ c et d).

a) PRISE EN COMPTE DES DEGRÉS DE LIBERTÉ DE TRANSLATION DANS L'ÉQUATION PILOTE

Les éléments de la matrice densité atomique sont maintenant repérés par des nombres quantiques internes (a ou b) et externes (\mathbf{p}). Nous nous intéresserons ici aux populations $\pi_{b,p} = \sigma_{bp,bp}$ et $\pi_{a,p} = \sigma_{ap,ap}$ qui représentent la probabilité d'avoir l'atome dans l'état b ou a avec l'impulsion globale \mathbf{p} .

Dans le point de vue dipolaire électrique (voir § 5 de l'appendice), l'hamiltonien V_R de couplage entre l'atome, supposé globalement neutre, et le rayonnement est égal à :

$$V_R = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) = -i \mathbf{d} \cdot \sum_i \sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}} [\epsilon_i a_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}} - \epsilon_i a_i^+ e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}}] \quad (\text{E.27})$$

où \mathbf{d} est le moment dipolaire électrique de l'atome et où l'opérateur champ $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ est évalué au centre de masse. Les équations généralisant (E.15) s'écrivent alors

$$\dot{\pi}_{b,p} = \sum_{p'} \Gamma_{ap' \rightarrow bp} \pi_{a,p'} - \sum_{p'} \Gamma_{bp \rightarrow ap} \pi_{b,p} \quad (\text{E.28.a})$$

$$\dot{\pi}_{a,p} = \sum_{p'} \Gamma_{bp' \rightarrow ap} \pi_{b,p'} - \sum_{p'} \Gamma_{ap \rightarrow bp} \pi_{a,p} \quad (\text{E.28.b})$$

où les coefficients $\Gamma_{ap' \rightarrow bp}$ et $\Gamma_{bp' \rightarrow ap}$ se déduisent de (C.5) et (E.10). Ainsi, en posant $\omega_{ba} = \omega_0$, nous avons

$$\begin{aligned} \Gamma_{ap' \rightarrow bp} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\{n_i\}} p(\{n_i\}) \times \\ &\times \sum_i |\langle b, \mathbf{p}; n_1, \dots, n_i - 1, \dots | V_R | a, \mathbf{p}'; n_1, \dots, n_i, \dots \rangle|^2 \times \\ &\times \delta \left[\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{\mathbf{p}'^2}{2M} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.29})$$

A partir de (E.27), il est possible de décomposer l'élément de matrice de V_R en une partie dépendant des variables du centre de masse et une partie dépendant des variables internes et des variables du rayonnement. Nous obtenons ainsi, avec des notations identiques à celle du paragraphe E-1 :

$$\begin{aligned} \langle b, \mathbf{p}; n_1, \dots, n_i - 1, \dots | V_R | a, \mathbf{p}'; n_1, \dots, n_i, \dots \rangle &= \\ &= \sqrt{n_i} \langle \mathbf{p} | e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}} | \mathbf{p}' \rangle \langle b, 0 | V | a, 1_i \rangle \quad (\text{E.30}) \end{aligned}$$

Par ailleurs, l'équation (E.26) entraîne que

$$\langle \mathbf{p} | \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}) | \mathbf{p}' \rangle = \delta_{\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_i, \mathbf{p}'} \quad (\text{E.31})$$

ce qui permet de réécrire $\Gamma_{ap' \rightarrow bp}$ sous la forme

$$\begin{aligned} \Gamma_{ap' \rightarrow bp} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \langle n_i \rangle | \langle b, 0 | V | a, 1_i \rangle |^2 \times \\ &\quad \times \delta_{\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_i, \mathbf{p}'} \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \hbar\xi_D - \hbar\xi_R) \quad (\text{E.32}) \end{aligned}$$

où ξ_D et ξ_R sont les déplacements de fréquence dûs respectivement à l'effet Doppler et à l'effet de recul

$$\xi_D = \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{p} / M \quad (\text{E.33})$$

$$\xi_R = \hbar\mathbf{k}_i^2 / 2M \quad (\text{E.34})$$

Un calcul analogue donne

$$\begin{aligned} \Gamma_{bp' \rightarrow ap} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i (\langle n_i \rangle + 1) | \langle b, 0 | V | a, 1_i \rangle |^2 \times \\ &\quad \times \delta_{\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}_i, \mathbf{p}'} \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \hbar\xi_D + \hbar\xi_R) \quad (\text{E.35}) \end{aligned}$$

où ξ_D et ξ_R sont toujours donnés par (E.33) et (E.34).

Remarques

(i) En écrivant les équations (E.28), nous avons implicitement supposé que le terme diagonal $\sigma_{bp, bp}$ n'est couplé à aucun terme non diagonal $\sigma_{ap', ap''}$. L'absence de tels couplages ne résulte pas d'une approximation séculaire analogue à celle du paragraphe B.4. En effet, \mathbf{p}' et \mathbf{p}'' peuvent avoir même module et des directions différentes, de sorte que la fréquence d'évolution propre de la cohérence $\sigma_{ap', ap''}$ peut être aussi petite que l'on veut. En fait, le terme couplant $\sigma_{bp, bp}$ à $\sigma_{ap', ap''}$ est, d'après (C.19), égal à :

$$\begin{aligned} &\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\{n_i\}} p(\{n_i\}) \sum_i \langle b, \mathbf{p}; n_1, \dots, n_i - 1, \dots | V_R | a, \mathbf{p}'; n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \times \\ &\quad \times \langle a, \mathbf{p}''; n_1, \dots, n_i, \dots | V_R | b, \mathbf{p}; n_1, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \delta \left[\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{\mathbf{p}'^2}{2M} \right) \right] \quad (\text{E.36}) \end{aligned}$$

Séparons alors, dans les éléments de matrice de V_R , la partie dépendant des variables du centre de masse comme nous l'avons déjà fait en (E.30). Le premier élément de matrice est proportionnel à $\delta_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}_i, \mathbf{p}'}$ et le second, à $\delta_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}_i, \mathbf{p}''}$. Il apparaît ainsi que l'on doit avoir $\mathbf{p}' = \mathbf{p}''$: pour l'équation pilote considérée ici, il n'y a donc pas de couplage entre termes diagonaux et non diagonaux de la matrice densité σ .

(ii) Une étude plus précise incluant l'effet Doppler du second ordre est parfois nécessaire. Il faut alors remplacer (E.33) par

$$\xi_D = \frac{\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{p}}{M} - \frac{\omega_0}{2} \frac{\mathbf{p}^2}{M^2 c^2} \quad (\text{E.37})$$

Reportons maintenant (E.32) et (E.35) dans les équations (E.28). Les sommes sur \mathbf{p}' se réduisent à un seul terme, compte tenu des fonctions delta de conservation de l'impulsion :

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{b,\mathbf{p}} = & \sum_i \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \hbar\xi_D - \hbar\xi_R) \times \\ & \times \{ \langle n_i \rangle \pi_{a,\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}_i} - (\langle n_i \rangle + 1) \pi_{b,\mathbf{p}} \} \end{aligned} \quad (\text{E.38.a})$$

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{a,\mathbf{p}} = & \sum_i \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i + \hbar\xi_D + \hbar\xi_R) \times \\ & \times \{ (\langle n_i \rangle + 1) \pi_{b,\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}_i} - \langle n_i \rangle \pi_{a,\mathbf{p}} \} \end{aligned} \quad (\text{E.38.b})$$

Pour simplifier les calculs, nous ignorons la dépendance de $\sum_i |\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2$ vis-à-vis de la direction $\kappa_i = \mathbf{k}_i/k_i$ de \mathbf{k}_i , ce qui revient à prendre un diagramme de rayonnement isotrope (voir remarque plus loin). Cette quantité ne dépend donc plus que de ω_i (elle varie d'ailleurs linéairement avec $\omega_i = ck_i$ d'après (E.1)) et peut s'exprimer en fonction de Γ

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_0) \\ &= \frac{L^3}{\pi\hbar^2 c^3} \omega_0^3 \sum_i \frac{|\langle b;0 | V | a;1_i \rangle|^2}{\omega_i} \end{aligned} \quad (\text{E.39})$$

En passant à la limite $L \rightarrow \infty$ et en appelant $\pi_j(\mathbf{p})$ (avec $j = a, b$) la densité de population du niveau j dans l'espace des impulsions, nous obtenons finalement pour (E.38) :

$$\begin{aligned}\pi_b(\mathbf{p}) = \Gamma \int_0^{+\infty} \frac{\omega^3}{\omega_0^3} d\omega \int \frac{d\Omega}{4\pi} \delta(\omega_0 - \omega + \xi_D - \xi_R) \times \\ \times \{ \langle n(\omega) \rangle \pi_a(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}) - [\langle n(\omega) \rangle + 1] \pi_b(\mathbf{p}) \} \quad (\text{E.40.a})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\pi_a(\mathbf{p}) = \Gamma \int_0^{+\infty} \frac{\omega^3}{\omega_0^3} d\omega \int \frac{d\Omega}{4\pi} \delta(\omega_0 - \omega + \xi_D + \xi_R) \times \\ \times \{ [\langle n(\omega) \rangle + 1] \pi_b(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) - \langle n(\omega) \rangle \pi_a(\mathbf{p}) \} \quad (\text{E.40.b})\end{aligned}$$

où $d\Omega$ est l'angle solide élémentaire autour de $\kappa = \mathbf{k}/k$ et où, pour chaque direction κ , le module de \mathbf{k} est déterminé par l'argument de la fonction delta, c'est-à-dire, par les décalages Doppler et de recul.

La comparaison des équations (E.15) et (E.40) fait apparaître clairement les effets nouveaux qui sont liés au mouvement de l'atome. Tout d'abord, quand l'atome passe d'un niveau à l'autre par absorption ou émission d'un photon, son impulsion augmente ou diminue d'une quantité $\hbar\mathbf{k}$ égale à l'impulsion du photon absorbé ou émis. D'autre part, les taux d'absorption et d'émission induite font intervenir les nombres moyens de photons ayant une fréquence qui n'est plus ω_0 , mais qui est corrigée des déplacements Doppler et de recul.

Remarque

Si le diagramme de rayonnement n'est pas isotrope, il suffit de remplacer dans (E.40) $d\Omega/4\pi$ par $I(\kappa)d\Omega/4\pi$, où $I(\kappa)$ est le diagramme de rayonnement normalisé $\left(\int d\Omega I(\kappa)/4\pi = 1 \right)$, qui possède la propriété importante d'être pair ($I(\kappa) = I(-\kappa)$). Les coefficients de friction γ et de diffusion D introduits plus loin sont alors des tenseurs et non plus des scalaires.

b) EQUATION DE FOKKER-PLANCK POUR LA FONCTION DE DISTRIBUTION DES VITESSES ATOMIQUES

La densité de probabilité pour que l'impulsion de l'atome soit égale à \mathbf{p} , quel que soit son état interne, est donnée par

$$\pi(\mathbf{p}) = \pi_a(\mathbf{p}) + \pi_b(\mathbf{p}) \quad (\text{E.41})$$

Dans le point de vue dipolaire électrique, l'impulsion \mathbf{p} coïncide avec la quantité de mouvement Mv (voir § 5 de l'appendice), de sorte que la fonction $\pi(\mathbf{p})$ peut être aussi considérée comme la fonction de distribution des vitesses v . Nous essayons maintenant de déduire des équations (E.40) une équation d'évolution pour $\pi(\mathbf{p})$.

a) *Les infiniment petits du problème*

Dans tout ce qui suit, nous supposons que $\hbar k$ est petit devant la largeur Δp des fonctions $\pi_a(p)$ et $\pi_b(p)$ et que ξ_D et ξ_R sont petits devant la largeur $\Delta\omega$ de la distribution spectrale de $\omega^3 \langle n(\omega) \rangle$. Nous introduisons ainsi deux infiniment petits

$$\eta_1 = \frac{\hbar k_0}{\Delta p} \quad (\text{E.42.a})$$

$$\eta_2 = \frac{\xi_D}{\Delta\omega} \sim \frac{k_0 \Delta p}{M \Delta\omega} \quad (\text{E.42.b})$$

à partir desquels il est possible d'exprimer $\xi_R/\Delta\omega$

$$\frac{\xi_R}{\Delta\omega} \sim \frac{\hbar k_0^2}{2M\Delta\omega} \sim \eta_1 \eta_2 \quad (\text{E.42.c})$$

La vitesse de variation $\dot{\pi}(p)$ de $\pi(p)$ est obtenue par addition des deux équations (E.40). Il apparaît alors que $\dot{\pi}(p)$ s'annule si l'on fait $\xi_D = \xi_R = 0$ dans l'argument de la fonction delta et $\hbar k = \mathbf{0}$ dans $\pi_a(p - \hbar k)$ et $\pi_b(p + \hbar k)$. A l'ordre 0 en η_1 et η_2 , on a donc $\dot{\pi}(p) = 0$.

Remarque

La comparaison de l'effet Doppler du second ordre $\xi_D^{(2)}$, introduit en (E.37), et de $\Delta\omega$ montre que

$$\frac{\xi_D^{(2)}}{\Delta\omega} \sim \left(\frac{k_0 \Delta p}{M \Delta\omega} \right)^2 \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \sim \eta_2^2 \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \quad (\text{E.43})$$

Dans les situations où $\Delta\omega \leq \omega_0$, l'effet Doppler du deuxième ordre apparaît comme un infiniment petit d'ordre au plus égal à η_2^2 .

b) *Développement perturbatif de l'équation d'évolution de $\pi(p)$*

Comme $\dot{\pi}(p)$ s'annule à l'ordre 0 en η_1 et η_2 , il convient de développer, d'une part $\pi_j(p \pm \hbar k)$ (avec $j = a, b$) en puissances de $\eta_1 = \hbar k / \Delta p$, et d'autre part la fonction delta en puissances de ξ_D et ξ_R (ce qui reviendra après intégration sur ω à développer le facteur multipliant la fonction delta en puissances de $\xi_D / \Delta\omega$ et $\xi_R / \Delta\omega$)

$$\pi_j(p \pm \hbar k) = \pi_j(p) \pm \hbar k \cdot \nabla \pi_j + \frac{1}{2} \sum_{l,m} k_l k_m \frac{\partial^2 \pi_j}{\partial k_l \partial k_m} + \dots \quad (\text{E.44})$$

avec $l, m = x, y, z$.

$$\delta(\omega_0 - \omega + \xi_D \pm \xi_R) = \delta(\omega_0 - \omega) + (\xi_D \pm \xi_R) \delta'(\omega_0 - \omega) +$$

$$+ \frac{1}{2} (\xi_D \pm \xi_R)^2 \delta''(\omega_0 - \omega) + \dots \quad (\text{E.45})$$

Le développement (E.45) peut être ordonné en fonction des infiniment petits introduits au paragraphe précédent de façon à faire apparaître successivement les termes d'ordre 0, d'ordre η_2 , d'ordre $\eta_1\eta_2$, d'ordre $\eta_2^2\dots$

$$\delta(\omega_0 - \omega + \xi_D \pm \xi_R) = \delta(\omega_0 - \omega) + \\ + \xi_D \delta'(\omega_0 - \omega) \pm \xi_R \delta'(\omega_0 - \omega) + \frac{1}{2} \xi_D^2 \delta''(\omega_0 - \omega) + \dots \quad (\text{E.46})$$

Dans l'équation donnant $\dot{\pi}(\mathbf{p})$ obtenue en sommant les deux équations (E.40), la contribution des termes d'ordre 1 en η_1 ou η_2 est nulle à cause de l'intégrale angulaire

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} k_l = 0 \quad (\text{E.47})$$

(où $l = x, y, z$). Les termes en $\eta_1\eta_2$ proviennent, soit des produits des seconds termes des développements (E.44) et (E.46), soit du troisième terme de (E.46). En utilisant

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} k_l k_m = \frac{k^2}{3} \delta_{lm} \quad (\text{E.48})$$

on trouve que la contribution des termes en $\eta_1\eta_2$ à $\dot{\pi}$ s'écrit :

$$- \Gamma \frac{d \langle n(\omega_0) \rangle}{d \omega_0} \frac{\hbar k_0^2}{3 M} \nabla \cdot \{ \mathbf{p} [\pi_a(\mathbf{p}) - \pi_b(\mathbf{p})] \} + \\ + \Gamma \frac{5\hbar\omega_0}{3 Mc^2} \nabla \cdot \{ \mathbf{p} [(\langle n(\omega_0) \rangle + 1)\pi_b(\mathbf{p}) - \langle n(\omega_0) \rangle \pi_a(\mathbf{p})] \} \quad (\text{E.49})$$

Les termes en η_1^2 proviennent des termes d'ordre 2 du développement (E.44) des π_j . Leur contribution à $\dot{\pi}$ est égale à :

$$\Gamma \frac{\hbar^2 k_0^2}{6} [\langle n(\omega_0) \rangle \Delta \pi(\mathbf{p}) + \Delta \pi_b(\mathbf{p})] \quad (\text{E.50})$$

Enfin, les termes en η_2^2 se compensent entre (E.40.a) et (E.40.b) et disparaissent de l'équation de $\dot{\pi}$.

Ainsi, à l'ordre 2 inclus en η_1 et η_2 , $\dot{\pi}(\mathbf{p})$ se réduit à la somme de (E.49) et (E.50). Il apparaît alors clairement que $\dot{\pi}(\mathbf{p})$ ne dépend pas seulement de $\pi(\mathbf{p})$ (et des dérivées de $\pi(\mathbf{p})$ par rapport à \mathbf{p}). La présence de $\pi_a(\mathbf{p})$ et $\pi_b(\mathbf{p})$ dans (E.49) et (E.50) traduit le couplage qui existe entre variables internes et externes.

Remarque

A l'ordre de perturbation considéré ici, $\dot{\pi}$ reste égal à la somme de (E.49) et (E.50) même lorsque l'effet Doppler du deuxième ordre est inclus dans

ξ_D . Ceci résulte du fait que le terme linéaire en ξ_D , obtenu en développant la fonction delta, disparaît dans la somme de (E.40.a) et (E.40.b) quand on fait $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ dans $\pi_j(\mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k})$.

γ) Elimination adiabatique des variables internes

Le fait que $\dot{\pi}(\mathbf{p})$ soit plus petit que $\dot{\pi}_a(\mathbf{p})$ ou $\dot{\pi}_b(\mathbf{p})$ par un facteur de l'ordre de $\eta_1\eta_2$ ou η_1^2 signifie que le temps caractéristique d'évolution des variables externes est beaucoup plus long que celui des variables internes. Nous allons utiliser cette différence entre les deux échelles de temps pour éliminer les variables internes de l'équation donnant $\dot{\pi}(\mathbf{p})$.

Comme les termes (E.49) et (E.50), dont la somme donne $\dot{\pi}(\mathbf{p})$, sont déjà d'ordre 2 en η_1 et η_2 , on peut se contenter de l'ordre 0 en η_1 et η_2 pour étudier l'évolution des populations $\pi_a(\mathbf{p})$ et $\pi_b(\mathbf{p})$ qui figurent dans ces termes. Or, à cet ordre 0 en η_1 et η_2 , les équations (E.40) deviennent

$$\dot{\pi}_b(\mathbf{p}) = \Gamma' \pi_a(\mathbf{p}) - (\Gamma + \Gamma') \pi_b(\mathbf{p}) \quad (\text{E.51.a})$$

$$\dot{\pi}_a(\mathbf{p}) = -\Gamma' \pi_a(\mathbf{p}) + (\Gamma + \Gamma') \pi_b(\mathbf{p}) \quad (\text{E.51.b})$$

où

$$\Gamma' = \Gamma \langle n(\omega_0) \rangle \quad (\text{E.51.c})$$

puisque le rayonnement est isotrope (voir (E.16)). Il s'ensuit que, à l'ordre 0 en η_1 et η_2 , $\pi_a(\mathbf{p})$ et $\pi_b(\mathbf{p})$ tendent avec une constante de temps très courte, égale à $1/(\Gamma + 2\Gamma')$, vers les valeurs

$$\pi_a(\mathbf{p}) = \frac{\Gamma + \Gamma'}{\Gamma + 2\Gamma'} \pi(\mathbf{p}) = \frac{1 + \langle n(\omega_0) \rangle}{1 + 2 \langle n(\omega_0) \rangle} \pi(\mathbf{p}) \quad (\text{E.52.a})$$

$$\pi_b(\mathbf{p}) = \frac{\Gamma'}{\Gamma + 2\Gamma'} \pi(\mathbf{p}) = \frac{n \langle n(\omega_0) \rangle}{1 + 2 \langle n(\omega_0) \rangle} \pi(\mathbf{p}) \quad (\text{E.52.b})$$

On peut donc considérer que $\pi_a(\mathbf{p})$ et $\pi_b(\mathbf{p})$ s'adaptent quasi-instantanément aux variations beaucoup plus lentes de $\pi(\mathbf{p})$ et prennent à chaque instant les valeurs données en (E.52). Le report de ces équations dans (E.49) et (E.50) permet ainsi « d'éliminer adiabatiquement » π_a et π_b au profit de π . La contribution de la deuxième ligne de (E.49) s'annule et on obtient pour $\dot{\pi}$ l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \pi(\mathbf{p}, t) = \gamma \nabla \cdot [\mathbf{p} \pi(\mathbf{p}, t)] + \frac{D}{3} \Delta \pi(\mathbf{p}, t) \quad (\text{E.53})$$

où les coefficients γ et D sont donnés par

$$\gamma = -\frac{\hbar k_0^2}{3 M} \Gamma \frac{\Gamma}{\Gamma + 2\Gamma'} \frac{d \langle n(\omega_0) \rangle}{d \omega_0} \quad (\text{E.54})$$

$$D = \hbar^2 k_0^2 \frac{\Gamma'(\Gamma + \Gamma')}{\Gamma + 2\Gamma'} \quad (\text{E.55})$$

L'équation aux dérivées partielles (E.53) est une équation de Fokker-Planck très analogue à celle que l'on rencontre dans l'étude du mouvement Brownien.

c) EVOLUTION DE L'IMPULSION MOYENNE ET DE LA DISPERSION SUR LES IMPULSIONS

Pour interpréter physiquement le coefficient γ de (E.53), calculons la vitesse de variation de l'impulsion moyenne

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int d^3p \mathbf{p} \pi(\mathbf{p}, t) \quad (\text{E.56})$$

Il suffit pour cela de multiplier les deux membres de (E.53) par \mathbf{p} et d'intégrer sur \mathbf{p} . En intégrant par parties les deux termes du second membre et en supposant que $\pi(\mathbf{p})$ tend suffisamment vite vers zéro quand $|\mathbf{p}| \rightarrow \infty$, nous obtenons

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = -\gamma \langle \mathbf{p} \rangle \quad (\text{E.57})$$

Nous supposons dans tout ce qui suit que $d\langle n(\omega_0) \rangle / d\omega_0$ est négatif, c'est-à-dire que le nombre moyen de photons par mode décroît avec la fréquence du mode au voisinage de ω_0 . Le coefficient γ défini en (E.54) est alors positif et l'équation (E.57) le fait apparaître comme un taux d'amortissement de l'impulsion moyenne (coefficient de friction).

Le même type de calcul conduit à

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p}^2 \rangle = -2\gamma \langle \mathbf{p}^2 \rangle + 2D \quad (\text{E.58})$$

ce qui montre que la variance σ_p^2 de \mathbf{p}

$$\sigma_p^2 = \langle \mathbf{p}^2 \rangle - \langle \mathbf{p} \rangle^2 \quad (\text{E.59})$$

obéit, compte tenu de (E.57) et (E.58) à

$$\frac{d}{dt} \sigma_p^2 = -2\gamma \sigma_p^2 + 2D \quad (\text{E.60})$$

Le coefficient $2D$ caractérise donc la vitesse d'accroissement de la variance de \mathbf{p} qui est par ailleurs amortie avec un taux 2γ . Le coefficient D est donc un coefficient de diffusion de l'impulsion (voir § 1-b du complément C_{IV}).

Essayons maintenant de comprendre qualitativement pourquoi la vitesse atomique est amortie si $d\langle n(\omega_0) \rangle / d\omega_0$ est négatif. Considérons

pour cela un modèle simplifié à une dimension où les impulsions de l'atome et des photons sont parallèles ou antiparallèles à Ox . Si l'atome se dirige vers la droite ($v > 0$), les photons qui se propagent en sens inverse doivent avoir une fréquence plus faible que ω_0 , $\omega_0 - \omega_0 v/c$, pour interagir de manière résonnante avec l'atome, alors que les photons se propageant dans le même sens doivent avoir une fréquence plus élevée, $\omega_0 + \omega_0 v/c$ (effet Doppler). Si $d\langle n(\omega_0) \rangle / d\omega_0$ est négatif, l'atome « verra » donc plus de photons résonnantes arriver en sens inverse de son mouvement que dans le même sens. L'impulsion qu'il absorbera sera donc préférentiellement dirigée en sens inverse de son mouvement et l'atome sera ralenti.

Le raisonnement précédent peut être rendu quantitatif. Calculons tout d'abord l'impulsion moyenne gagnée par un atome d'impulsion p sous l'effet des processus d'absorption et d'émission induite. L'atome a une probabilité relative $\hat{\pi}_a(p) = \pi_a(p)/\pi(p)$ d'être dans l'état a , de sorte que pendant le temps dt , il absorbe $\Gamma \langle n(\omega_0 + k \cdot v) \rangle \hat{\pi}_a(p) dt d\Omega / 4\pi$ photons dont le vecteur d'onde k pointe dans l'angle solide $d\Omega$. Le nombre de photons émis de manière stimulée est donné par une expression analogue où $\hat{\pi}_a$ est remplacé par $\hat{\pi}_b$. La vitesse de variation de l'impulsion atomique due à ces processus est donc, à l'ordre 1 inclus en $k \cdot v / \Delta\omega$

$$\frac{dp}{dt} = \hbar k \Gamma \left[\langle n(\omega_0) \rangle + \frac{k \cdot p}{M} \frac{d\langle n(\omega_0) \rangle}{d\omega_0} \right] [\hat{\pi}_a(p) - \hat{\pi}_b(p)] \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (\text{E.61})$$

L'intégration angulaire sur $\kappa = k/k$ donne alors, compte tenu de (E.47) et (E.48)

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\hbar k_0^2}{3M} \frac{d\langle n(\omega_0) \rangle}{d\omega_0} \Gamma [\hat{\pi}_a(p) - \hat{\pi}_b(p)] p \quad (\text{E.62})$$

Quant à l'émission spontanée, elle ne contribue pas à dp/dt car, dans le référentiel au repos de l'atome, elle se produit avec des probabilités égales dans deux directions opposées et ne fait donc pas varier en moyenne la vitesse de l'atome. Finalement, en reportant dans (E.62) les expressions adiabatiques (E.52) de π_a et π_b et en moyennant sur l'impulsion initiale p de l'atome, nous retrouvons l'équation (E.57) avec l'expression (E.54) de γ .

Pour comprendre l'expression (E.55) du coefficient de diffusion D , il suffit de noter qu'à chaque processus élémentaire d'absorption, d'émission induite ou spontanée, l'impulsion de l'atome varie d'une quantité dont le module vaut $\hbar k_0$ et dont la direction varie aléatoirement d'un processus à l'autre. Dans l'espace des impulsions, l'impulsion de l'atome effectue donc une *marche au hasard* de pas $\hbar k_0$. Soit dn le nombre total moyen de processus élémentaires pendant

dt pour un atome d'impulsion \mathbf{p}

$$dn = [\Gamma' \hat{\pi}_a(\mathbf{p}) + (\Gamma + \Gamma') \hat{\pi}_b(\mathbf{p})] dt \quad (\text{E.63})$$

D'après les propriétés bien connues d'une marche au hasard, l'accroissement de \mathbf{p}^2 pendant dt vaut

$$d\mathbf{p}^2 = \hbar^2 k_0^2 dn = \hbar^2 k_0^2 [\Gamma' \hat{\pi}_a(\mathbf{p}) + (\Gamma + \Gamma') \hat{\pi}_b(\mathbf{p})] dt \quad (\text{E.64})$$

Il suffit alors de reporter dans (E.64) les expressions adiabatiques (E.52) de $\hat{\pi}_a$ et $\hat{\pi}_b$, puis de moyenner sur l'impulsion initiale \mathbf{p} de l'atome, pour trouver que \mathbf{p}^2 croît en $2Dt$ où D est donné par (E.55).

d) DISTRIBUTION STATIONNAIRE. EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE

L'équation de Fokker-Planck (E.53) peut être écrite sous une forme d'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t} \pi(\mathbf{p},t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{p},t) = 0 \quad (\text{E.65})$$

où le « courant » $\mathbf{J}(\mathbf{p},t)$ est donné par

$$\mathbf{J}(\mathbf{p},t) = -\gamma \mathbf{p} \pi(\mathbf{p},t) - \frac{D}{3} \nabla \pi(\mathbf{p},t) \quad (\text{E.66})$$

On vérifie alors aisément que l'équation de Fokker-Planck admet une solution stationnaire ($\partial \pi / \partial t = 0$), donnée par la solution de l'équation $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ qui s'écrit

$$\pi_{st}(\mathbf{p}) = \mathcal{N} \exp \left[-\frac{3\gamma}{2D} \mathbf{p}^2 \right] \quad (\text{E.67})$$

où \mathcal{N} est une constante de normalisation. Dans l'état stationnaire, la fonction de distribution des impulsions ou des vitesses est donc une gaussienne.

Considérons enfin le cas particulier où le rayonnement interagissant avec l'atome est en équilibre thermodynamique. Il faut alors utiliser l'expression (E.17) de $\langle n(\omega_0) \rangle$. Compte tenu de (E.16), nous obtenons pour les coefficients γ et D donnés en (E.54) et (E.55)

$$\gamma = \frac{\Gamma}{6 \operatorname{sh} \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \frac{\hbar\omega_0}{Mc^2} \quad (\text{E.68.a})$$

$$D = \frac{\Gamma}{2 \operatorname{sh} \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)} \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{c^2} \quad (\text{E.68.b})$$

Le report de (E.68) dans (E.67) montre alors que

$$\pi_{sf}(\mathbf{p}) = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{\mathbf{p}^2}{2Mk_B T}\right] \quad (\text{E.69})$$

qui n'est autre qu'une distribution d'équilibre thermodynamique à la température T . Nous généralisons ainsi les résultats du paragraphe E-1 précédent et montrons que les degrés de liberté externes, comme les degrés de liberté internes, atteignent l'équilibre thermodynamique lorsque l'atome interagit avec un rayonnement lui-même en équilibre thermodynamique.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

Abragam (chapitre VIII), Louisell (chapitre 6), Cohen-Tannoudji (§ 4), Agarwal (chapitre 6). Voir aussi l'article original de R.K. Wangsness and F. Bloch, Phys. Rev. **89**, 728 (1953).

L'étude de l'évolution des vitesses atomiques faite au paragraphe E-2 est tirée pour l'essentiel de la thèse de J. Dalibard, Université Pierre et Marie Curie, Paris (1986).

COMPLÉMENT A_{IV}
**FLUCTUATIONS ET RÉPONSE LINÉAIRE
APPLICATION AUX PROCESSUS RADIATIFS**

Lorsque le rayonnement peut être considéré comme un réservoir, nous avons montré dans le chapitre que l'évolution de l'opérateur densité des particules est décrite par une équation pilote. Dans cette équation, le réservoir n'intervient que par une seule fonction $g(\tau)$, moyenne à deux temps d'une observable R du réservoir.

Le but de ce complément est tout d'abord de relier les parties réelle et imaginaire de $g(\tau)$ à deux fonctions statistiques du réservoir, une fonction de corrélation symétrique et une susceptibilité linéaire. Nous montrons dans le paragraphe 1 comment ces fonctions statistiques peuvent être utilisées pour caractériser les effets sur le petit système de son couplage avec le réservoir. Il est possible de dégager des expressions ainsi obtenues une interprétation physique très générale conduisant à considérer que chacun des systèmes couplés fluctue et polarise l'autre. De manière plus précise, on distingue d'une part des processus où c'est le petit système qui évolue selon sa dynamique propre, polarise le réservoir qui réagit ensuite sur le mouvement du système ; d'autre part des phénomènes où ce sont les fluctuations du réservoir qui polarisent le petit système et modifient ses propriétés.

Nous appliquons ensuite (§ 2) ces résultats généraux au cas d'un atome interagissant avec un rayonnement homogène et isotrope. Le rayonnement du corps noir et le vide sont deux exemples d'une telle situation. Nous calculons les fonctions statistiques associées à l'atome et au rayonnement, et nous interprétons les déplacements des niveaux atomiques, ainsi que les échanges d'énergie entre atome et rayonnement en termes d'effets des fluctuations du rayonnement, et d'effets de la réaction de rayonnement.

1. Fonctions statistiques et interprétation de l'équation pilote

Partons de l'expression (B.22) de la fonction $g(\tau)$, à partir de laquelle sont définis les coefficients (B.43) de l'équation pilote :

$$g(\tau) = \text{Tr}_R[\sigma_R \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0)] \quad (1)$$

La fonction $g(\tau)$ n'est pas réelle, bien que R soit hermitique, car en général $\tilde{R}(\tau)$ et $\tilde{R}(0)$ ne commutent pas. Pour séparer les parties réelle et imaginaire de $g(\tau)$, écrivons :

$$g(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) + \tilde{R}(0) \tilde{R}(\tau) \rangle_R + \frac{i}{2} \langle [\tilde{R}(\tau), \tilde{R}(0)]/i \rangle_R \quad (2)$$

où $\langle \rangle_R$ signifie la moyenne sur le réservoir dans l'état défini par σ_R . Le premier terme de (2) est une fonction de corrélation symétrique, le second est relié à une susceptibilité linéaire du réservoir. Nous allons analyser les propriétés de ces deux fonctions avant de revenir à l'interprétation de l'équation pilote.

a) FONCTION DE CORRÉLATION SYMÉTRIQUE

Soit $C_R(\tau)$ la fonction de corrélation symétrique de l'observable R

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}(\tau) \tilde{R}(0) + \tilde{R}(0) \tilde{R}(\tau) \rangle_R \quad (3)$$

Cette fonction est réelle et tend vers la fonction de corrélation habituelle à la limite classique. Elle décrit physiquement la dynamique des fluctuations de l'observable R dans l'état σ_R . Si R était une fonction aléatoire classique de fréquence ω_0 ,

$$R(t) = R_0 \exp[-i(\omega_0 t + \varphi)] + c.c. \quad (4)$$

et si l'amplitude R_0 et la phase φ étaient des variables aléatoires indépendantes, φ étant équipartie entre 0 et 2π , la fonction de corrélation de R vaudrait :

$$C_R(\tau) = \langle R_0^2 \rangle e^{-i\omega_0\tau} + c.c. \quad (5)$$

L'expression explicite de la fonction de corrélation quantique définie par (3) est donnée par la partie réelle de l'expression (B.23) de $g(\tau)$

$$C_R(\tau) = \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \cos(\omega_{\mu\nu}\tau) \quad (6)$$

Elle se présente sous la forme d'une somme d'expressions du type (5) correspondant aux différentes fréquences de Bohr intervenant dans le mouvement de R . La fonction $C_R(\tau)$ est paire en τ .

Nous utiliserons également la transformée de Fourier $\hat{C}_R(\omega)$ de $C_R(\tau)$ définie par

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \hat{C}_R(\omega) e^{-i\omega\tau} \quad (7)$$

et qui vaut

$$\hat{C}_R(\omega) = \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} \pi |R_{\mu\nu}|^2 [\delta(\omega + \omega_{\mu\nu}) + \delta(\omega - \omega_{\mu\nu})] \quad (8)$$

La fonction $\hat{C}_R(\omega)$ est, elle aussi, réelle et paire.

Remarque

La fonction $C_R(\tau)$ est la fonction d'autocorrélation de la grandeur R . La fonction de corrélation de deux grandeurs différentes (réelles) R_p et R_q est définie par

$$C_{pq}(\tau) = \frac{1}{2} \langle \tilde{R}_p(0) \tilde{R}_q(\tau) + \tilde{R}_q(\tau) \tilde{R}_p(0) \rangle_R \quad (9)$$

Les propriétés énoncées précédemment se généralisent comme suit :

$$C_{pq}(\tau) = C_{pq}^*(\tau) ; \quad C_{pq}(\tau) = C_{qp}(-\tau) \quad (10.a)$$

$$\hat{C}_{pq}^*(\omega) = \hat{C}_{pq}(-\omega) ; \quad \hat{C}_{pq}(\omega) = \hat{C}_{qp}(-\omega) \quad (10.b)$$

b) SUSCEPTIBILITÉ LINÉAIRE

La fonction de corrélation symétrique (3) décrit les fluctuations propres de l'observable R du réservoir. Une autre fonction statistique, la susceptibilité linéaire, permet de caractériser sa réponse linéaire à une perturbation extérieure.

Rappelons tout d'abord quelques résultats simples pour un oscillateur harmonique classique amorti. Lorsqu'un tel oscillateur est soumis à une force périodique

$$f(t) = F e^{-i\omega t} + c.c. , \quad (11)$$

il effectue un mouvement d'oscillation forcée d'amplitude complexe X

$$x(t) = X e^{-i\omega t} + c.c. \quad (12)$$

L'amplitude X est proportionnelle à F

$$X = \hat{\chi}(\omega) F \quad (13)$$

Le coefficient de proportionnalité $\hat{\chi}(\omega)$ est la susceptibilité linéaire de l'oscillateur à la fréquence ω . C'est une fonction des paramètres caractérisant l'oscillateur. En séparant les parties réelles et imaginaire de $\hat{\chi}(\omega)$

$$\hat{\chi}(\omega) = \hat{\chi}'(\omega) + i \hat{\chi}''(\omega) \quad (14)$$

on fait apparaître les composantes $\hat{\chi}'F$ et $\hat{\chi}''F$ du mouvement de x respectivement en phase et en quadrature avec la force $f(t)$. De façon plus générale, si $f(t)$ est une somme d'exponentielles oscillantes

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) e^{-i\omega t} \quad (15)$$

la réponse de l'oscillateur est la somme des réponses relatives à chaque

fréquence ω .

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hat{\chi}(\omega) F(\omega) e^{-i\omega t} \quad (16)$$

En inversant la transformée de Fourier (15) et en introduisant celle de la fonction $\hat{\chi}(\omega)$

$$\chi(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hat{\chi}(\omega) e^{-i\omega\tau} \quad (17)$$

on met l'expression (16) sous la forme

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(t - t') f(t') dt' \quad (18)$$

Revenons maintenant au réservoir \mathcal{R} , qui est un système quantique. S'il est soumis à une perturbation

$$V(t) = -R \lambda(t) \quad (19)$$

où $\lambda(t)$ est une fonction classique, son état va s'écartier de l'état stationnaire initial σ_R . Par la théorie des perturbations, on peut déterminer le mouvement induit par cette perturbation sur la valeur moyenne d'une observable, par exemple R , dont la moyenne dans l'état stationnaire initial est supposée nulle pour simplifier. A l'ordre 1 en λ (*), on obtient, pour la valeur moyenne de R à l'instant t , une expression analogue à (18) :

$$\langle R \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_R(\tau) \lambda(t - \tau) d\tau \quad (20)$$

où la susceptibilité linéaire $\chi_R(\tau)$ du réservoir est donnée par :

$$\chi_R(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \langle [\tilde{R}(0), \tilde{R}(-\tau)] \rangle_R \quad (21)$$

La moyenne est prise comme précédemment dans l'état σ_R et $\theta(\tau)$ vaut 1 pour $\tau > 0$ et 0 pour $\tau < 0$. La comparaison de (2) et (21) fait apparaître le lien entre $\chi_R(\tau)$ et la partie imaginaire de $g(\tau)$

$$\chi_R(\tau) = \frac{2}{\hbar} \theta(\tau) \operatorname{Im} g(-\tau) \quad (22)$$

(*) Voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 6 du complément E_{IV}.

L'expression explicite de $\chi_R(\tau)$ se déduit ainsi directement de (B.23) :

$$\chi_R(\tau) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \theta(\tau) \sin \omega_{\mu\nu} \tau, \quad (23)$$

ainsi que sa transformée de Fourier, définie comme en (7) :

$$\hat{\chi}_R(\omega) = \frac{-1}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} - \omega} - i\pi \delta(\omega_{\mu\nu} + \omega) + i\pi \delta(\omega_{\mu\nu} - \omega) \right] \quad (24)$$

Contrairement à $\hat{C}_R(\omega)$, la fonction $\hat{\chi}_R(\omega)$ n'est pas réelle, et il est intéressant de séparer ses parties réelle et imaginaire qui caractérisent la réponse en phase et en quadrature à la fréquence ω :

$$\hat{\chi}_R(\omega) = \hat{\chi}'_R(\omega) + i \hat{\chi}''_R(\omega) \quad (25)$$

$$\hat{\chi}'_R(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} - \omega} \right] \quad (26.a)$$

$$\hat{\chi}''_R(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 [\delta(\omega_{\mu\nu} + \omega) - \delta(\omega_{\mu\nu} - \omega)] \quad (26.b)$$

Notons que $\hat{\chi}'_R(\omega)$ est paire en ω , et $\hat{\chi}''_R(\omega)$ impaire.

Remarque

La généralisation au cas d'un couplage $V = -\sum_q R_q \lambda_q$ des formules (20) et (21) s'écrit

$$\langle R_p \rangle_t = \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{pq}(\tau) \lambda_q(t - \tau) d\tau \quad (27)$$

$$\chi_{pq}(\tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \langle [\tilde{R}_p(0), \tilde{R}_q(-\tau)] \rangle_R \quad (28)$$

Si $\hat{\chi}'_{pq}$ et $\hat{\chi}''_{pq}$ sont les parties réactives et dissipatives définies en séparant les parties principales et les fonctions delta comme dans (26.a et b) (ce ne sont plus les parties réelles et imaginaires de $\hat{\chi}_{pq}(\omega)$), leurs propriétés de symétrie sont alors :

$$\hat{\chi}_{pq}(\omega) = \hat{\chi}_{pq}^*(-\omega) \quad (29)$$

$$\hat{\chi}'_{pq}(\omega) = [\hat{\chi}'_{qp}(\omega)]^*; \quad \hat{\chi}''_{pq}(\omega) = [\hat{\chi}''_{qp}(\omega)]^* \quad (30)$$

c) ENERGIE DE POLARISATION ET DISSIPATION

La susceptibilité linéaire intervient également dans les échanges d'énergie entre le système et le milieu extérieur au voisinage de l'équilibre. Pour le voir, revenons sur l'exemple de l'oscillateur classique amorti introduit au début du paragraphe précédent. Nous allons montrer que $\hat{\chi}''(\omega)$ et $\hat{\chi}'(\omega)$ apparaissent respectivement dans

les équations donnant l'énergie dissipée par les processus d'amortissement de l'oscillateur et l'énergie de polarisation de l'oscillateur. Les résultats ainsi obtenus nous permettront ensuite d'interpréter physiquement les expressions quantiques donnant les déplacements des niveaux d'énergie du petit système \mathcal{A} (§ 1-d) et les échanges d'énergie entre \mathcal{A} et \mathcal{R} (§ 1-e), une fois que ces expressions auront été réécrites sous une forme faisant apparaître explicitement les fonctions statistiques de \mathcal{A} et \mathcal{R} .

En régime permanent, le travail effectué par la force extérieure (11) vaut par unité de temps, et en moyenne sur une période T :

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) \dot{x}(t) \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T dt [-i\omega X e^{-i\omega t} + c.c.] [F e^{-i\omega t} + c.c.] \\ &= (-i\omega X F^* + c.c.) \\ &= \omega \dot{\chi}''(\omega)(2FF^*)\end{aligned}\quad (31)$$

Cette puissance est dissipée par le processus d'amortissement de l'oscillateur. C'est la raison pour laquelle $\dot{\chi}''(\omega)$ est appelée partie dissipative de la susceptibilité. Il apparaît clairement sur la première ligne de (31) que seule la partie f_v de la force $f(t)$ en phase avec la vitesse \dot{x} contribue à ce processus.

L'autre partie de la force, f_x , en phase avec x , ne travaille pas en régime stationnaire, mais uniquement lorsque l'amplitude de l'oscillation varie. Si cette variation est lente, le travail correspondant est stocké sous forme réversible dans l'oscillateur. Il est égal à

$$W = \int' f_x(t') \dot{x}(t') dt' \quad (32.a)$$

La partie quasi statique de W vaut :

$$\bar{W} = \int' dt' [F_x^* \dot{X} + c.c.] \quad (32.b)$$

où \dot{X} est la variation lente de l'amplitude de l'oscillation et où

$$F_x = \frac{\dot{\chi}'(\omega)}{|\dot{\chi}(\omega)|^2} X \quad (33)$$

est la partie de la force en phase avec X . En présence de la force excitatrice, une variation de l'amplitude d'oscillation se traduit également par une variation de l'énergie d'interaction

$$W_I = -f(t)x \quad (34)$$

qui vaut en moyenne sur une période (seul f_x y contribue)

$$\bar{W}_I = - (F_x^* X + c.c.) \quad (35)$$

Ainsi, en présence de la force excitatrice, et pour des variations lentes des paramètres, la quantité $U = \bar{W} + \bar{W}_I$ joue le rôle d'énergie potentielle. Elle vaut, après une intégration par partie de (32.b) qui fait disparaître \bar{W}_I :

$$\begin{aligned} U &= - \int^t dt' [\dot{F}_x^* X + c.c.] \\ &= - \dot{\chi}'(\omega) \int^t dt' [\dot{X}^* X + c.c.] / |\dot{\chi}(\omega)|^2 \\ &= - \dot{\chi}'(\omega) |X|^2 / |\dot{\chi}(\omega)|^2 = - \frac{1}{2} \dot{\chi}'(\omega) (2 F F^*) \end{aligned} \quad (36)$$

U représente la variation réversible de l'énergie de l'oscillateur du fait de sa « polarisation » en présence de la force $f(t)$. C'est la partie réactive $\dot{\chi}'(\omega)$ de la polarisabilité qui est associée à cet effet physique. Nous appellerons plus brièvement U , énergie de polarisation, par analogie avec l'effet d'un champ électrique statique sur un diélectrique.

d) INTERPRÉTATION PHYSIQUE DU DÉPLACEMENT DES NIVEAUX D'ÉNERGIE

L'interaction du petit système \mathcal{A} avec le réservoir \mathcal{R} se traduit, entre autres effets, par un déplacement des niveaux d'énergie de \mathcal{A} donné par la formule (C.15) du chapitre. Dans cette expression, l'élément de matrice $\langle \mu, a | V | \nu, n \rangle$ peut être factorisé en une partie relative à \mathcal{A} et une autre relative à \mathcal{R} :

$$\begin{aligned} \Delta_a &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} |\langle \mu | R | \nu \rangle|^2 \times \\ &\times \left(\sum_n |\langle a | A | n \rangle|^2 \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega_{an}} \right) \end{aligned} \quad (37)$$

Pour faire apparaître dans cette expression les fonctions statistiques étudiées plus haut, il faut exprimer la fraction $1/(\omega_{\mu\nu} + \omega_{an})$ comme un produit de fonctions relatives à chacun des deux systèmes, fonctions

ayant chacune une parité déterminée. Ainsi on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega_{an}} &= \frac{1}{4} \int d\omega \times \\ &\times \left\{ \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{\mu\nu} - \omega} \right) \left(\delta(\omega + \omega_{an}) + \delta(\omega - \omega_{an}) \right) + \right. \\ &+ \left. \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{an} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{an} - \omega} \right) \left(\delta(\omega + \omega_{\mu\nu}) + \delta(\omega - \omega_{\mu\nu}) \right) \right\} \quad (38) \end{aligned}$$

Lorsqu'on porte (38) dans (37), apparaissent $\hat{\chi}'_R(\omega)$, $\hat{\chi}'_{Aa}(\omega)$, $\hat{C}_R(\omega)$ et $\hat{C}_{Aa}(\omega)$, où $\hat{C}_{Aa}(\omega)$ et $\hat{\chi}_{Aa}(\omega)$ sont la fonction de corrélation symétrique et la susceptibilité linéaire de l'observable A du système \mathcal{A} dans l'état $|a\rangle$, données par des expressions analogues à (8) et (24), où seul $p_a = 1$ est non nul. Le déplacement Δ_a se présente sous la forme d'une somme de deux termes :

$$\Delta_a = \Delta_a^{fr} + \Delta_a^{rr} \quad (39)$$

où

$$\hbar \Delta_a^{fr} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hat{\chi}'_{Aa}(\omega) \hat{C}_R(\omega) \quad (40)$$

$$\hbar \Delta_a^{rr} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hat{\chi}'_R(\omega) \hat{C}_{Aa}(\omega) \quad (41)$$

L'interprétation de ces expressions est simple si on les rapproche de la formule (36) : $\hat{C}_R(\omega) d\omega / 2\pi$ représente la puissance spectrale définie en (8) des fluctuations de l'observable R du réservoir dans la bande de fréquence $d\omega$. La quantité $-(1/2) \hat{\chi}'_{Aa}(\omega) \hat{C}_R(\omega) d\omega / 2\pi$ est l'énergie de polarisation du système \mathcal{A} dans l'état a , par ces fluctuations. Ainsi $\hbar \Delta_a^{fr}$ représente l'énergie de polarisation du petit système dans l'état a par les fluctuations de la grandeur R du réservoir (l'indice supérieur *fr* est mis pour « fluctuations du réservoir »).

Dans (41), les rôles de \mathcal{A} et \mathcal{R} sont inversés. Δ_a^{rr} représente l'énergie de polarisation du réservoir par le petit système. Le mouvement de l'observable A dans l'état $|a\rangle$, caractérisé par \hat{C}_{Aa} , perturbe l'équilibre du réservoir, et l'interaction de A avec la polarisation ainsi créée dans \mathcal{R} , proportionnelle à $\hat{\chi}'_R$, donne naissance au déplacement d'énergie $\hbar \Delta_a^{rr}$. Ce déplacement représente donc l'effet de la « réaction du réservoir » sur le petit système (d'où l'indice supérieur *rr*). Comme précédemment, seule la partie réactive $\hat{\chi}'_R$ de la polarisabilité du réservoir contribue à l'énergie de polarisation.

e) INTERPRÉTATION PHYSIQUE DES ÉCHANGES D'ÉNERGIE

Considérons maintenant les échanges d'énergie entre le système \mathcal{A} et le réservoir \mathcal{R} . Nous partirons pour cela du taux de variation de l'énergie atomique moyenne, l'atome étant initialement dans l'état a :

$$\frac{d}{dt} \langle H_A \rangle_a = \sum_b (E_b - E_a) \Gamma_{a \rightarrow b} \quad (42)$$

où $\Gamma_{a \rightarrow b}$ est le taux de transition de a vers b , produit par l'interaction avec le réservoir et donné par (C.5).

Le remplacement de $\Gamma_{a \rightarrow b}$ par son expression (C.5) donne une expression explicite générale pour $d \langle H_A \rangle_a / dt$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle H_A \rangle_a &= \sum_b \hbar \omega_{ba} \left\{ \sum_\mu \frac{2\pi}{\hbar} p_\mu \times \right. \\ &\quad \times \sum_\nu |\langle \mu | R | \nu \rangle|^2 |\langle a | A | b \rangle|^2 \delta(\hbar \omega_{\mu\nu} + \hbar \omega_{ab}) \Big\} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\mu p_\mu \sum_\nu |\langle \mu | R | \nu \rangle|^2 \left(\sum_b \omega_{ba} |\langle a | A | b \rangle|^2 \delta(\omega_{\mu\nu} + \omega_{ab}) \right) \end{aligned} \quad (43)$$

Procédons comme au paragraphe 1.d et écrivons

$$\begin{aligned} \omega_{ba} \delta(\omega_{\mu\nu} + \omega_{ab}) &= \frac{1}{4} \int d\omega \omega \times \\ &\quad \times \{ [\delta(\omega_{\mu\nu} + \omega) + \delta(\omega_{\mu\nu} - \omega)] [\delta(\omega + \omega_{ab}) - \delta(\omega - \omega_{ab})] + \\ &\quad + [\delta(\omega_{\mu\nu} - \omega) - \delta(\omega_{\mu\nu} + \omega)] [\delta(\omega + \omega_{ab}) + \delta(\omega - \omega_{ab})] \} \end{aligned} \quad (44)$$

Lorsqu'on porte (44) dans (43), apparaissent les fonctions statistiques de \mathcal{A} et \mathcal{R} , et $d \langle H_A \rangle_a / dt$ se présente sous la forme d'une somme de deux termes

$$\frac{d}{dt} \langle H_A \rangle_a = \dot{Q}^{fr} + \dot{Q}'' \quad (45)$$

où

$$\dot{Q}^{fr} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \hat{C}_R(\omega) \hat{\chi}''_{Aa}(\omega) \quad (46.a)$$

$$\dot{Q}'' = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \hat{\chi}''_R(\omega) \hat{C}_{Aa}(\omega) \quad (46.b)$$

Les deux termes (46.a) et (46.b) ont une interprétation physique particulièrement claire lorsqu'on les rapproche de l'expression (31) décrivant l'absorption d'énergie par un système. Le premier fait intervenir la fonction de corrélation symétrique du réservoir et la susceptibilité linéaire de l'atome. Il décrit donc l'absorption d'énergie par le petit système, lorsque ce système est perturbé par les fluctuations du réservoir. Le deuxième terme s'exprime à l'aide de la fonction de corrélation symétrique du petit système et de la susceptibilité linéaire du réservoir. Il décrit l'amortissement par le réservoir des mouvements atomiques. Comme \dot{Q}'' est l'énergie gagnée par l'atome, $(-\dot{Q}'')$ est bien l'énergie absorbée par le réservoir conformément à l'interprétation de l'expression (31).

2. Application aux processus radiatifs

Nous supposons maintenant que \mathcal{A} est un atome fixé à l'origine $\mathbf{0}$ des coordonnées et que \mathcal{R} est un rayonnement homogène et isotrope de spectre large, défini par les probabilités $p(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$ comme dans la partie E du chapitre. Le nombre moyen de photons dans le mode i , $\langle n_i \rangle$, est défini par (E.12). Il ne dépend que de ω_i et sera noté $\langle n(\omega_i) \rangle$. Ce nombre moyen de photons par mode à la fréquence ω_i est relié à la densité d'énergie du rayonnement par (E.20). Pour simplifier, nous modéliserons l'atome par un seul électron se déplaçant dans un potentiel à symétrie sphérique autour de l'origine, à l'intérieur d'un volume de dimensions petites par rapport aux longueurs d'onde du rayonnement présent. Ainsi, nous ferons l'approximation des grandes longueurs d'onde pour tous les modes pris en compte, dont la fréquence est inférieure à une fréquence de coupure ω_M .

Soit \mathbf{r} et \mathbf{p} les opérateurs position et impulsion de l'électron, q et m sa charge et sa masse, $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ le potentiel vecteur en $\mathbf{0}$. Avec les approximations mentionnées précédemment, le couplage entre l'atome et le rayonnement se réduit à (*)

$$V = V_x + V_y + V_z \quad (47.a)$$

$$V_x = - \left(\frac{q}{m} p_x \right) A_x(\mathbf{0}) \quad (47.b)$$

Le couplage n'a pas la forme simple $V = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{R}$, mais est plutôt une somme de tels couplages. Toutefois, le système étant isotrope, on peut montrer facilement que la vitesse de variation de la matrice densité σ_A est la somme des vitesses correspondant à V_x, V_y, V_z . Ainsi, il suffit de calculer les fonctions statistiques relatives à $R = A_x(\mathbf{0})$ pour le champ, et $A = qp_x/m$ pour l'atome, puis de sommer sur x, y, z .

(*) A l'approximation des grandes longueurs d'ondes, l'hamiltonien H_{I2} n'agit pas sur les variables de l'électron.

a) CALCUL DES FONCTIONS STATISTIQUES

Commençons par celles du champ. Les expressions (8) de $\hat{C}_R(\omega)$ et (24) de $\hat{\chi}_R(\omega)$ ont la même forme :

$$S_{\pm}(\omega) = \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |R_{\mu\nu}|^2 f^{\pm}(\omega_{\mu\nu}, \omega) \quad (48)$$

où $f^{\pm}(\omega_{\mu\nu}, \omega)$ est une fonction de parité déterminée \pm vis-à-vis de $\omega_{\mu\nu}$: + pour \hat{C} , et - pour $\hat{\chi}$. En explicitant (48), on obtient :

$$\begin{aligned} S_{\pm}(\omega) &= \sum_{(n_i)} p(n_1, \dots, n_i, \dots) \times \\ &\quad \times \sum_j \{ |\langle \dots, n_j, \dots | A_x(0) | \dots, n_j + 1, \dots \rangle|^2 f^{\pm}(-\omega_j, \omega) + \\ &\quad + |\langle \dots, n_j, \dots | A_x(0) | \dots, n_j - 1, \dots \rangle|^2 f^{\pm}(\omega_j, \omega) \} \end{aligned} \quad (49)$$

Nous avons utilisé le fait que $A_x(0)$ est linéaire en a_j et a_j^+ , et change n_j de ± 1 . Les éléments de matrice de (49) valent :

$$|\langle \dots, n_j, \dots | A_x(0) | \dots, n_j \pm 1, \dots \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_j L^3} \epsilon_{jx}^2 \left(n_j + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (50)$$

La somme sur les distributions de photons $\{n_i\}$ pondérées par $p(\dots, n_i, \dots)$ fait apparaître $\langle n_i \rangle$, de sorte que

$$\begin{aligned} S_{\pm}(\omega) &= \sum_j \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_j L^3} \epsilon_{jx}^2 [\langle n_j + 1 \rangle f^{\pm}(-\omega_j, \omega) + \langle n_j \rangle f^{\pm}(\omega_j, \omega)] \\ &= \sum_j \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_j L^3} \epsilon_{jx}^2 [\pm \langle n_j + 1 \rangle + \langle n_j \rangle] f^{\pm}(\omega_j, \omega) \end{aligned} \quad (51)$$

Remplaçons la somme discrète sur les modes par une somme sur les polarisations, calculée à l'aide de la formule (54) du complément A_I , et une intégrale sur k (dont la partie angulaire se calcule explicitement puisque $\langle n_j \rangle$ est supposé ne dépendre que de ω_j). Nous obtenons :

$$S_{\pm}(\omega) = \frac{1}{6\pi^2\epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \hbar\omega' [\pm \langle n(\omega') + 1 \rangle + \langle n(\omega') \rangle] f^{\pm}(\omega', \omega) \quad (52)$$

Ce résultat appliqué successivement à \hat{C}_R^{xx} , $\hat{\chi}'_R^{xx}$, $\hat{\chi}''_R^{xx}$ donne :

$$\begin{aligned} \hat{C}_R^{xx}(\omega) &= \int_0^{\omega_M} \frac{d\omega'}{3\pi\epsilon_0 c^3} \hbar\omega' \langle n(\omega') + \frac{1}{2} \rangle [\delta(\omega' + \omega) + \delta(\omega' - \omega)] \\ &= \frac{1}{3\pi\epsilon_0 c^3} \hbar |\omega| \langle n(|\omega|) + \frac{1}{2} \rangle \end{aligned} \quad (53)$$

$$\hat{\chi}'_{R}^{xx}(\omega) = \frac{1}{6\pi^2\varepsilon_0c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega} \right] \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \hat{\chi}''_{R}^{xx}(\omega) &= -\frac{1}{6\pi\varepsilon_0c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' [\delta(\omega' + \omega) - \delta(\omega' - \omega)] \\ &= \frac{1}{6\pi\varepsilon_0c^3} \omega \end{aligned} \quad (55)$$

Avant de commenter ces expressions au paragraphe suivant, donnons les expressions $\hat{C}_{Aa}^{xx}(\omega)$ et $\hat{\chi}_{Aa}^{xx}(\omega)$ de la fonction de corrélation de la variable atomique qp_x/m , et de la susceptibilité correspondante, lorsque l'atome se trouve dans l'état stationnaire $|a\rangle$. Les équations équivalentes à (8), (26.a) et (26.b) sont :

$$\hat{C}_{Aa}^{xx}(\omega) = \sum_b \frac{q^2}{m^2} |\langle a | p_x | b \rangle|^2 \pi [\delta(\omega_{ab} + \omega) + \delta(\omega_{ab} - \omega)] \quad (56)$$

$$\hat{\chi}_{Aa}^{xx}(\omega) = \sum_b \frac{-q^2}{\hbar m^2} |\langle a | p_x | b \rangle|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} - \omega} \right] \quad (57)$$

$$\hat{\chi}''_{Aa}^{xx}(\omega) = \sum_b \frac{q^2}{\hbar m^2} |\langle a | p_x | b \rangle|^2 \pi [\delta(\omega_{ab} + \omega) - \delta(\omega_{ab} - \omega)] \quad (58)$$

b) DISCUSSION PHYSIQUE

La puissance spectrale des fluctuations du champ apparaît comme la somme de deux termes :

$$\hat{C}_R^{xx}(\omega) = \frac{1}{3\pi\varepsilon_0c^3} \left[\hbar |\omega| \langle n(|\omega|) \rangle + \frac{1}{2} \hbar |\omega| \right] \quad (59)$$

Le premier fait intervenir le nombre moyen de photons par mode. Avec l'aide de (E.20), il peut être mis sous la forme $\pi u(\omega)/3\varepsilon_0\omega^2$, montrant ainsi qu'il est proportionnel à la densité d'énergie du rayonnement à la fréquence ω , quantité tout à fait classique. Le deuxième terme ajoute $\frac{1}{2}$ à $\langle n(\omega) \rangle$ pour tous les modes. Il correspond à la contribution des fluctuations du vide, dont l'énergie de point zéro vaut $\hbar\omega/2$. Ainsi, la puissance spectrale des fluctuations du vide est identique à celle d'un champ électromagnétique aléatoire isotrope classique dont la répartition en fréquence correspond à un demi-quantum par mode.

La situation est complètement différente pour la susceptibilité du champ, qui est indépendante de $\langle n(\omega) \rangle$. Cette propriété est reliée à la linéarité des équations de Maxwell : le champ créé par une source déterminée est indépendant du champ existant. Ceci entraîne en particulier que la susceptibilité du champ est la même pour une source microscopique et pour une source macroscopique classique. De fait,

(54) et (55) ne font pas intervenir \hbar . La susceptibilité du champ est une grandeur classique.

Notons enfin que, pour $\omega > 0$,

$$\hat{C}_R^{xx}(\omega) = 2\hbar \langle n(\omega) + \frac{1}{2} \rangle \hat{\chi}''_R^{xx}(\omega) \quad (60)$$

A l'équilibre thermodynamique, on a, d'après (E.17) :

$$2\langle n(\omega) + \frac{1}{2} \rangle = \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (61)$$

et

$$\hat{C}_R^{xx}(\omega) = \hbar \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \hat{\chi}''_R^{xx}(\omega) \quad (62)$$

Cette relation est l'expression dans ce cas particulier du théorème fluctuation-dissipation, reliant la densité spectrale des fluctuations à la partie dissipative de la susceptibilité.

c) DÉPLACEMENT DES NIVEAUX D'ÉNERGIE DÛ AUX FLUCTUATIONS DU CHAMP DE RAYONNEMENT

Pour calculer l'effet sur le niveau d'énergie atomique $|a\rangle$ des fluctuations du rayonnement, explicitons l'expression (40) dans le cas du couplage de l'atome avec la composante $A_x(0)$ du potentiel vecteur. En utilisant les expressions (57) et (53) de $\hat{\chi}'_{Aa}^{xx}$ et \hat{C}_R^{xx} , on obtient :

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_{ax}^{fr} = & -\frac{1}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \times \\ & \times \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_b \frac{q^2}{m^2} |\langle a | p_x | b \rangle|^2 \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} - \omega} \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{3\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \hbar\omega' \langle n(\omega') + \frac{1}{2} \rangle [\delta(\omega' + \omega) + \delta(\omega' - \omega)] \right\} \end{aligned} \quad (63)$$

Dans l'intégrale sur ω , les contributions de $\delta(\omega' + \omega)$ et $\delta(\omega' - \omega)$ se doublent, car le reste de l'intégrand est pair en ω . Il faut ensuite ajouter à (63) les contributions analogues de $A_y(0)$ et $A_z(0)$, ce qui donne

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_a^{fr} = & \frac{q^2}{6\pi^2\epsilon_0 m^2 c^3} \sum_b |\langle a | p | b \rangle|^2 \times \\ & \times \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \langle n(\omega') + \frac{1}{2} \rangle \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} + \omega'} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_{ab} - \omega'} \right] \end{aligned} \quad (64)$$

Le déplacement du niveau d'énergie dû aux fluctuations du champ apparaît comme la somme de l'effet $\Delta_a'^{fr}$ des photons présents, proportionnel à $\langle n(\omega) \rangle$, et de celui des fluctuations du vide Δ_a^{fv} correspondant au « $\frac{1}{2}$ par mode» dans (64).

Explicitons tout d'abord Δ_a^{fv} . En utilisant les résultats suivants :

$$\int_0^{\omega_M} \omega' d\omega' \mathcal{P} \frac{1}{\omega' \pm \omega_0} = \omega_M \mp \omega_0 \operatorname{Log} \frac{\omega_M}{\omega_0} + 0 \left(\frac{\omega_0}{\omega_M} \right) \quad (65.a)$$

$$\int_0^{\omega_M} \omega' d\omega' \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 + \omega'} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 - \omega'} \right] = -2 \omega_0 \operatorname{Log} \frac{\omega_M}{\omega_0} \quad (65.b)$$

on obtient :

$$\hbar \Delta_a^{fv} = \frac{q^2}{6\pi^2 \epsilon_0 m^2 c^3} \sum_b |\langle a | p | b \rangle|^2 (-\omega_{ab}) \operatorname{Log} \frac{\omega_M}{|\omega_{ab}|} \quad (66)$$

Après quelques transformations qui sont détaillées dans l'exercice 7, cette expression peut être mise sous la forme :

$$\hbar \Delta_a^{fv} = \frac{\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left(\operatorname{Log} \frac{\omega_M}{cK_a} \right) \langle a | \frac{q^2}{\epsilon_0} \delta(r) | a \rangle \quad (67)$$

(α = constante de structure fine, $\hbar c K_a$ = énergie d'excitation atomique moyenne). Ce déplacement n'affecte que les états s : c'est le déplacement de Lamb dont il a déjà été question dans l'étude des corrections radiatives (chapitre II, § E.1.b, complément B_{II} et exercice 7). Le calcul précédent indique clairement son origine physique : les fluctuations du vide font subir à l'électron un mouvement de vibration au cours duquel il moyenne le potentiel coulombien sur une distance de l'ordre de $\sqrt{\alpha} \hbar/mc$. Le potentiel moyen n'est différent de la valeur du potentiel à la position moyenne qu'à l'intérieur de la source du potentiel de Coulomb, d'où la fonction $\delta(r)$. Notons que le coefficient $\alpha(\hbar/mc)^2$ est proportionnel à \hbar : le déplacement de Lamb est un effet quantique, tout comme les fluctuations du vide qui lui donnent naissance. Toutefois, une fois ces dernières admises, l'effet qu'elles créent n'est pas différent de celui que produirait un champ classique caractérisé par une densité spectrale correspondant à une énergie $\hbar\omega/2$ par mode.

Revenons à la partie $\Delta_a'^{fr}$ de Δ_a^{fr} , proportionnelle à $\langle n(\omega') \rangle$ (voir (64)). Elle correspond aux corrections radiatives stimulées que nous avons décrites au paragraphe E.2 du chapitre II. Supposons pour simplifier que $\langle n(\omega') \rangle$ ne soit important qu'autour d'une fréquence ω_L assez proche de ω_{ab} pour que seul un niveau particulier contribue à la somme sur tous les niveaux b de (64). Le déplacement correspondant

du niveau a vaut :

$$\hbar \Delta_a'^{fr} = \frac{q^2}{6\pi^2 \epsilon_0 m^2 c^3} |\langle a | \mathbf{p} | b \rangle|^2 \frac{2\omega_{ab}\omega_L}{\omega_{ab}^2 - \omega_L^2} \int d\omega' \langle n(\omega') \rangle \quad (68)$$

C'est le déplacement lumineux dû au champ de rayonnement. Notons que cette quantité peut être aussi exprimée en fonction de la valeur quadratique moyenne du champ électrique du rayonnement. En effet $\langle n(\omega) \rangle d\omega$ est relié à la densité d'énergie dans la même bande de fréquence $u(\omega)d\omega$ par la formule (E.20), et l'intégrale sur la fréquence de cette dernière n'est rien d'autre que la densité d'énergie du rayonnement

$$\int d\omega' u(\omega') = \frac{\epsilon_0}{2} \langle E_\perp^2 + c^2 B^2 \rangle = \epsilon_0 \langle E_\perp^2 \rangle \quad (69)$$

(Pour un rayonnement libre et stationnaire $\langle E_\perp^2 \rangle = c^2 \langle B^2 \rangle$). Compte tenu de la relation $\langle a | \mathbf{p} | b \rangle = im \omega_{ab} \langle a | \mathbf{r} | b \rangle$, et de l'approximation $|\omega_{ab}| \simeq \omega_L$, il vient alors

$$\hbar \Delta_a'^{fr} = \frac{\omega_{ab}}{\hbar(\omega_{ab}^2 - \omega_L^2)} q^2 \frac{|\langle a | \mathbf{r} | b \rangle|^2}{3} \langle E_\perp^2 \rangle \quad (70)$$

Cette expression, qui fait apparaître l'énergie de polarisation de l'atome par le champ électrique, justifie le nom d'effet Stark dynamique donné aussi à $\Delta_a'^{fr}$.

d) DÉPLACEMENT DES NIVEAUX D'ÉNERGIE DÛ À LA RÉACTION DE RAYONNEMENT

L'expression (41) de Δ_a'' fait intervenir la « susceptibilité » $\hat{\chi}'_R$ du champ, qui d'après (54) ne dépend pas de $\langle n(\omega) \rangle$. Le phénomène de réaction de rayonnement est donc indépendant du champ incident sur l'atome.

En utilisant les expressions (54) de $\hat{\chi}'_R^{xx}$ relative à $A_x(0)$ et (56) de \hat{C}_{Aa}^{xx} relative à p_x , puis en sommant sur des expressions analogues avec y et z , on obtient

$$\begin{aligned} \hbar \Delta_a'' &= -\frac{1}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \frac{1}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega} \right] \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \sum_b \frac{q^2}{m^2} |\langle a | \mathbf{p} | b \rangle|^2 \pi [\delta(\omega_{ab} + \omega) + \delta(\omega_{ab} - \omega)] \right\} \\ &= -\frac{q^2}{12\pi^2 \epsilon_0 m^2 c^3} \sum_b \int_0^{\omega_M} d\omega' \omega' |\langle a | \mathbf{p} | b \rangle|^2 \times \\ &\quad \times \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega' + \omega_{ab}} + \mathcal{P} \frac{1}{\omega' - \omega_{ab}} \right] \end{aligned} \quad (71)$$

L'intégrale sur ω' jusqu'à la borne ω_M donne alors, compte tenu de (65.a) :

$$\begin{aligned}\hbar\Delta_a'' &= \frac{-q^2}{6\pi^2\epsilon_0 m^2 c^3} \sum_b |\langle a | p | b \rangle|^2 \omega_M \\ &= -\frac{4}{3} \frac{\delta m}{m} \langle a | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | a \rangle\end{aligned}\quad (72)$$

où δm est la correction de l'énergie de masse de la particule associée au champ coulombien et donnée par $\delta mc^2 = \epsilon_{Coul}$. Nous retrouvons donc la correction à l'énergie cinétique de la particule associée à ce changement de masse. Le facteur $4/3$ est dû à la procédure non covariante de coupure que nous avons utilisée pour éliminer l'effet des modes de haute fréquence. Le même facteur apparaît aussi en théorie classique.

Notons que ϵ_{Coul} décrit l'énergie associée à l'interaction de la particule avec son propre champ coulombien, de la même façon que Δ_a'' décrit l'effet sur la particule de son interaction avec son propre champ transverse. Ces deux effets sont les mêmes qu'en électromagnétique classique, comme le montre l'absence de \hbar dans l'expression de δm . Ils sont indépendants du potentiel atomique et sont donc les mêmes pour une particule libre. Une autre conséquence de l'augmentation de masse de la particule est la diminution de sa fréquence cyclotron dans un champ magnétique. On peut expliquer ainsi qualitativement pourquoi le facteur de Landé apparent de l'électron est supérieur à 2 (voir exercices 10 et 12).

e) LES ÉCHANGES D'ÉNERGIE ENTRE L'ATOME ET LE RAYONNEMENT

Considérons successivement les taux \dot{Q}^{fr} et \dot{Q}'' associés respectivement aux fluctuations du rayonnement et à la réaction de rayonnement.

Avec les expressions (46.a), (59) et (58), et après sommation des effets relatifs aux trois composantes x, y, z , \dot{Q}^{fr} se met sous la forme :

$$\begin{aligned}\dot{Q}^{fr} &= \frac{-q^2}{3\pi\epsilon_0\hbar m^2 c^3} \sum_b |\langle a | p | b \rangle|^2 \times \\ &\times \omega_{ab} [\hbar |\omega_{ab}| \langle n(|\omega_{ab}|) \rangle + \frac{1}{2} \hbar |\omega_{ab}|]\end{aligned}\quad (73)$$

Il est intéressant d'exprimer (73) en fonction du taux d'émission spontanée Γ_{ab}^{sp} sur la transition ab , (qui se produit évidemment du niveau le plus élevé vers le niveau le plus bas). En explicitant (E.4.a), on trouve

$$\Gamma_{ab}^{sp} = \frac{q^2 |\langle a | p | b \rangle|^2 |\omega_{ab}|}{3\pi\epsilon_0\hbar m^2 c^3}\quad (74)$$

de sorte que :

$$\dot{Q}^{fr} = \sum_b (E_b - E_a) \Gamma_{ab}^{sp} [\langle n(|\omega_{ab}|) \rangle + \frac{1}{2}] \quad (75)$$

Comme une perturbation aléatoire classique, les fluctuations du rayonnement transfèrent la population de l'état a vers les autres niveaux b supérieurs ou inférieurs. Comme au paragraphe 2-b le rayonnement présent contribue à ce processus proportionnellement à $\langle n(|\omega_{ab}|) \rangle$ par mode, et les fluctuations du vide proportionnellement à $\frac{1}{2}$. On peut d'ailleurs noter que ces dernières donnent un taux de transition égal à la moitié seulement de Γ_{ab}^{sp} .

La quantité \dot{Q}'' se calcule de la même façon à partir de (46.b), (55) et (56). On trouve :

$$\dot{Q}'' = \frac{-1}{6\pi\epsilon_0 c^3} \sum_b \frac{q^2}{m^2} |\langle a | \mathbf{p} | b \rangle|^2 \omega_{ab}^2 \quad (76)$$

Cette expression peut être mise sous une forme particulièrement simple, car $\langle a | \mathbf{p} | b \rangle \omega_{ab}$ est directement relié à l'élément de matrice de l'accélération $\ddot{\mathbf{r}}$ de l'électron dans le potentiel atomique :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \langle a | \mathbf{p} | b \rangle \omega_{ab} &= \frac{1}{m\hbar} \langle a | [H_A, \mathbf{p}] | b \rangle \\ &= -\frac{i}{m} \langle a | \dot{\mathbf{p}} | b \rangle \\ &= -i \langle a | \ddot{\mathbf{r}} | b \rangle \end{aligned} \quad (77)$$

On peut alors utiliser la relation de fermeture sur b et obtenir

$$\dot{Q}'' = -\frac{2}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \langle a | (\ddot{\mathbf{r}})^2 | a \rangle \quad (78)$$

L'énergie perdue par l'atome par unité de temps, du fait de la réaction de rayonnement, est égale à la moyenne dans l'état $|a\rangle$ de la puissance rayonnée classiquement par la particule, proportionnelle au carré de son accélération. \dot{Q}'' est d'ailleurs toujours négatif et correspond à une perte d'énergie, même pour l'état fondamental de l'atome. On retrouve donc ici des résultats bien connus en électrodynamique classique : force de freinage de Lorentz, et chute de l'électron sur le noyau. Bien sûr, il n'est pas possible de considérer seulement l'effet de la réaction de rayonnement, car même en l'absence de rayonnement, les fluctuations du vide existent et jouent un rôle comme nous l'avons vu au paragraphe précédent. Pour comparer leur rôle respectif, il est intéressant de

mettre (76) sous la même forme que (75). On obtient

$$\dot{Q}'' = \sum_b - |E_b - E_a| \frac{\Gamma_{ab}^{sp}}{2} \quad (79)$$

alors que

$$\dot{Q}^{fv} = \sum_b (E_b - E_a) \frac{\Gamma_{ab}^{sp}}{2} \quad (80)$$

Si $|a\rangle$ est l'état fondamental, $|E_b - E_a| = (E_b - E_a)$ et $\dot{Q}'' + \dot{Q}^{fv} = 0$. L'état atomique fondamental est stable, parce que les fluctuations du vide compensent exactement l'effet de la réaction de rayonnement. Le caractère quantique du champ, dont les fluctuations du vide sont une manifestation, est donc essentiel pour préserver la stabilité de l'état fondamental de l'atome. Ce résultat est très général (*): le couplage d'un système quantique à un système dynamique classique conduirait à des incohérences liées ici au fait que les relations d'incertitude seraient violées pour l'électron s'il perdait de l'énergie à partir de l'état fondamental. Si $|a\rangle$ est un niveau excité, les deux taux de variation de l'énergie se retranchent vers les niveaux b au-dessus de a (l'atome ne peut pas gagner d'énergie) et se doublent vers les niveaux b inférieurs. Ainsi, on peut dire que les fluctuations du vide et la réaction de rayonnement contribuent à parts égales au taux de transition total d'émission spontanée Γ_{ab}^{sp} .

RÉFÉRENCES

Un exposé général sur les fonctions de corrélations et les susceptibilités peut être trouvé dans Martin, Les Houches 1967. Voir aussi Landau et Lifchitz, Physique Statistique, chapitre XII.

Pour l'application particulière considérée dans ce complément, on trouvera des discussions plus détaillées dans J. Dalibard, J. Dupont-Roc et C. Cohen-Tannoudji, J. Physique **43**, 1617 (1982) ; **45**, 637 (1984), et dans les références qui y sont citées.

(*) Senitzky, I.R., Phys. Rev. Lett. **20**, 1062 (1968).

COMPLÉMENT B_{IV}

ÉQUATION PILOTE POUR UN OSCILLATEUR HARMONIQUE AMORTI

1. Système physique considéré

Dans la partie E du chapitre, nous avons explicité l'équation pilote pour un atome à deux niveaux interagissant avec le rayonnement. Nous considérons dans ce complément le cas où le petit système \mathcal{A} est un oscillateur harmonique à une dimension de fréquence ω_0 et d'hamiltonien

$$H_A = \hbar\omega_0(b^+b + \frac{1}{2}) \quad (1)$$

où b^+ et b sont les opérateurs de création et d'annihilation de cet oscillateur. Comme dans l'exemple de la partie E, le réservoir \mathcal{R} est constitué par une infinité d'oscillateurs harmoniques i à une dimension, de fréquence ω_i et d'opérateurs de création et d'annihilation a_i^+ et a_i , de sorte que l'hamiltonien H_R de \mathcal{R} s'écrit

$$H_R = \sum_i \hbar\omega_i(a_i^+a_i + \frac{1}{2}) \quad (2)$$

Enfin, nous prenons un hamiltonien de couplage très simple entre \mathcal{A} et \mathcal{R} , de la forme

$$V = \sum_i (g_i b^+ a_i + g_i^* b a_i^+) \quad (3)$$

où g_i est la constante de couplage entre \mathcal{A} et l'oscillateur i de \mathcal{R} . Chacun des termes de (3) décrit des processus où \mathcal{A} gagne (ou perd) un quantum d'énergie $\hbar\omega_0$ tandis qu'un oscillateur i de \mathcal{R} perd (ou gagne) un quantum $\hbar\omega_i$. Pour simplifier, nous n'avons pas pris dans V des termes du type $b a_i$ ou $b^+ a_i^+$ car les processus antirésonnantes auxquels ils donnent naissance ne peuvent pas contribuer à l'amortissement de \mathcal{A} .

Un tel modèle peut décrire plusieurs situations physiques différentes. Par exemple, \mathcal{A} peut être un oscillateur harmonique matériel, c'est-à-dire une charge élastiquement liée à l'origine (et assujettie à se déplacer sur un seul axe, de manière à être assimilable à un oscillateur à une dimension), et les oscillateurs i de \mathcal{R} peuvent être les divers modes du rayonnement. L'équation pilote de \mathcal{A} décrit alors comment le mouvement de la charge élastiquement liée est amorti par l'émission spontanée

née, l'absorption et l'émission induite de rayonnement. On peut aussi considérer que \mathcal{A} est un mode d'une cavité électromagnétique, les oscillateurs i étant des oscillateurs matériels contenus dans les parois de la cavité. L'équation pilote de \mathcal{A} décrit alors l'amortissement du mode propre de la cavité dû aux pertes dans les parois.

Outre son intérêt intrinsèque pour l'étude des deux situations physiques précédentes, l'exemple étudié dans ce complément présente le grand avantage de conduire à des équations de Heisenberg couplées pour les opérateurs b et a_i qui sont *linéaires* vis-à-vis de ces opérateurs. Il est alors très facile de déduire de ces équations une équation d'évolution pour b qui ressemble beaucoup à l'équation de Langevin de la théorie classique du mouvement Brownien. C'est ce que nous faisons dans le complément C_{IV}, où nous montrons également le lien qui existe entre les fluctuations et la dissipation, aussi bien en théorie classique qu'en théorie quantique.

Pour déterminer la forme de l'équation pilote de l'oscillateur harmonique, on pourrait évidemment utiliser les résultats de la partie C du chapitre, et calculer explicitement les coefficients de l'équation pilote dans ce cas particulier. Nous allons suivre ici une démarche différente, et établir directement, à partir de (B.30), une équation opératorielle pour le mouvement de σ , ne faisant pas référence à une base particulière (§ 2). Nous utiliserons ensuite cette équation pour déterminer l'équation d'évolution des populations des niveaux d'énergie de H_A , et celle des valeurs moyennes de certaines observables (§ 3). Enfin, en projetant cette équation sur une base d'états cohérents, nous en déduirons l'équation d'évolution de la distribution de quasi-probabilité $P_N(\beta, \beta^*)$, qui a la forme d'une équation de Fokker-Planck (§ 4).

2. Forme opératorielle de l'équation pilote

Effectuons sur l'équation (B.30) le changement de variables (B.32) et utilisons le fait que $\tau_c \ll \Delta t$ pour étendre à $+\infty$ la borne supérieure de l'intégrale sur $\tau = t' - t''$ et à t la borne inférieure de l'intégrale sur t' (voir discussion de la fin du paragraphe B-3). Il vient

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_0^\infty dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' Tr_R[\tilde{V}(t'), [\tilde{V}(t''), \tilde{\sigma}(t) \otimes \sigma_R]] \quad (4)$$

Ecrivons V sous la forme :

$$V = -[b^+ R^{(+)} + b R^{(-)}] \quad (5)$$

où

$$R^{(+)} = -\sum_i g_i a_i \quad ; \quad R^{(-)} = -\sum_i g_i^* a_i^+ \quad (6)$$

Supposons σ_R diagonal dans la base $\{ |n_1, n_2 \dots n_i \dots \rangle \}$ des états propres de H_R (σ_R est toujours donné par la formule (E.8)). Les deux opérateurs $\tilde{V}(t')$ et $\tilde{V}(t'')$ de (4) doivent nécessairement contenir l'un des a_i , l'autre des a_i^+ , pour que la trace sur R de leur produit par σ_R donne un résultat non nul dans (4). Une telle restriction conduit à deux seules possibilités, la première consistant à prendre $\tilde{V}(t') = -\tilde{b}^+(t')\tilde{R}^{(+)}(t')$ et $\tilde{V}(t'') = -\tilde{b}(t'')\tilde{R}^{(-)}(t'')$, la seconde se déduisant de la première par échange de t' et t'' . De plus, on peut vérifier que les deux termes de (4) correspondant à ces deux possibilités sont hermitiques conjugués l'un de l'autre. Par ailleurs, les opérateurs $\tilde{b}(t), \tilde{a}_i(t) \dots$ ont, en représentation d'interaction, une dépendance temporelle très simple, $\tilde{b}(t) = b e^{-i\omega_0 t}$, $\tilde{a}_i(t) = a_i e^{-i\omega_i t} \dots$ par suite de la simplicité des commutateurs $[b, H_A], [a_i, H_R] \dots$

Finalement, en utilisant l'invariance d'une trace dans une permutation circulaire et le fait que l'intégrand de (4) ne dépend que de $t' - t''$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \tilde{\sigma}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\hbar^2} \times \\ &\times \left\{ (b^+ b \tilde{\sigma} - b \tilde{\sigma} b^+) \int_0^\infty \langle \tilde{R}^{(+)}(t') \tilde{R}^{(-)}(t'') \rangle_R e^{i\omega_0(t' - t'')} d(t' - t'') + \right. \\ &+ (\tilde{\sigma} b b^+ - b^+ \tilde{\sigma} b) \int_0^\infty \langle \tilde{R}^{(-)}(t'') \tilde{R}^{(+)}(t') \rangle_R e^{i\omega_0(t' - t'')} d(t' - t'') \Big\} + \\ &+ h.c. \end{aligned} \quad (7)$$

Calculons maintenant les deux moyennes à deux temps qui apparaissent dans (7). En utilisant (6) et (E.8), on obtient

$$\begin{aligned} \langle \tilde{R}^{(+)}(t') \tilde{R}^{(-)}(t'') \rangle_R &= \sum_i |g_i|^2 \langle a_i a_i^+ \rangle_R e^{-i\omega_i(t' - t'')} \\ &= \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{-i\omega_i(t' - t'')} \end{aligned} \quad (8)$$

où $\langle n_i \rangle$ est le nombre moyen de quanta d'excitation de l'oscillateur i , toujours donné par (E.12). Un calcul analogue donne

$$\langle \tilde{R}^{(-)}(t'') \tilde{R}^{(+)}(t') \rangle_R = \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{-i\omega_i(t' - t'')} \quad (9)$$

La première intégrale de (7) vaut donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{-i(\omega_i - \omega_0)\tau} &= \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) \left[i \mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 - \omega_i} + \pi \delta(\omega_0 - \omega_i) \right] \\ &= \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} + i (\Delta + \Delta') \end{aligned} \quad (10)$$

où les quantités Γ , Γ' , Δ , Δ' , qui seront interprétées physiquement plus loin, sont données par

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |g_i|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i) \quad (11.a)$$

$$\Gamma' = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i) \quad (11.b)$$

$$\hbar\Delta = \mathcal{P} \sum_i \frac{|g_i|^2}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i} \quad (12.a)$$

$$\hbar\Delta' = \mathcal{P} \sum_i \frac{|g_i|^2 \langle n_i \rangle}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i} \quad (12.b)$$

Un calcul analogue donne pour la deuxième intégrale de (7)

$$\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{-i(\omega_i - \omega_0)\tau} = \frac{\Gamma'}{2} + i\Delta' \quad (13)$$

Finalement, en reportant (10) et (13) dans (7), en utilisant $[b, b^+] = 1$, et en repassant dans le point de vue de Schrödinger, on obtient la forme opératorielle suivante pour l'équation pilote

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dt} = & -\frac{\Gamma}{2} [\sigma, b^+ b]_+ - \Gamma' [\sigma, b^+ b]_+ - \Gamma' \sigma \\ & - i(\omega_0 + \Delta) [b^+ b, \sigma] \\ & + \Gamma b \sigma b^+ + \Gamma' (b^+ \sigma b + b \sigma b^+) \end{aligned} \quad (14)$$

Dans (14), $[A, B]_+$ représente l'anticommuteur $AB + BA$. On notera également l'absence de termes en Δ' .

Remarque

Comme dans la partie E, des simplifications apparaissent si le nombre moyen de quanta $\langle n_i \rangle$ de l'oscillateur i ne dépend que de l'énergie de cet oscillateur, et non des paramètres autres que l'énergie servant à caractériser les oscillateurs. La même démonstration que celle conduisant à (E.16) donne alors

$$\Gamma' = \Gamma \langle n(\omega_0) \rangle \quad (15)$$

où $\langle n(\omega_0) \rangle$ est le nombre moyen de quanta dans les oscillateurs du réservoir ayant même fréquence ω_0 que l'oscillateur \mathcal{A} . Si de plus \mathcal{R} est en équilibre thermodynamique, $\langle n(\omega_0) \rangle$ est égal à $[\exp(\hbar\omega_0/k_B T) - 1]^{-1}$.

3. Equation pilote dans la base des états propres de H_A

a) EVOLUTION DES POPULATIONS

Soit σ_{nn} la population du niveau d'énergie $|n\rangle$ de \mathcal{A} . L'équation (14) prise en valeur moyenne dans l'état $|n\rangle$ donne

$$\frac{d}{dt} \sigma_{nn} = -n\Gamma \sigma_{nn} + (n+1)\Gamma \sigma_{n+1,n+1} + (n+1)\Gamma' (\sigma_{n+1,n+1} - \sigma_{nn}) + n\Gamma' (\sigma_{n-1,n-1} - \sigma_{nn}) \quad (16)$$

L'interprétation de Γ et Γ' en découle immédiatement. Si l'on suppose que \mathcal{A} est un oscillateur atomique et \mathcal{R} le rayonnement, Γ est associé au processus d'émission spontanée, Γ' aux processus d'absorption et d'émission induite. Plus précisément, $n\Gamma$ est la probabilité d'émission spontanée par unité de temps du niveau $|n\rangle$ vers le niveau inférieur $|n-1\rangle$: le niveau $|n\rangle$ se vide par émission spontanée vers le niveau $|n-1\rangle$ avec un taux $n\Gamma$ et se remplit à partir du niveau $|n+1\rangle$ avec le taux $(n+1)\Gamma$ (flèches ondulées de la figure 1). Les facteurs n et $n+1$ sont simplement liés aux carrés des modules des éléments de matrice de b et b^+ apparaissant dans V (voir (3)) entre $|n\rangle$ et $|n-1\rangle$ ou entre $|n+1\rangle$ et $|n\rangle$. De même, les processus d'absorption vident le niveau $|n\rangle$ vers le niveau $|n-1\rangle$ avec un taux $(n+1)\Gamma'$ et le remplissent à partir du niveau $|n-1\rangle$ avec un taux $n\Gamma'$ (flèches droites montantes de la figure 3), les processus d'émission induite s'effectuant en sens inverse avec le même taux (flèches droites descendantes).

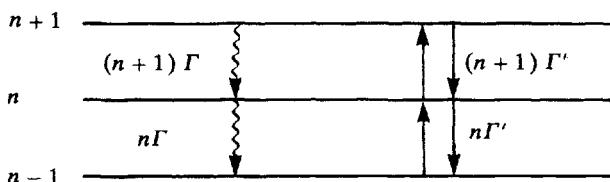


Figure 1. Taux de transfert entre les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique associés aux processus d'émission spontanée (flèches ondulées) et aux processus d'absorption et d'émission induite (flèches droites).

L'autre paramètre Δ apparaissant dans (14) est lié aux déplacements radiatifs « spontanés » se produisant en l'absence de toute excitation de \mathcal{R} ($\hbar\Delta$ ne dépend pas des $\langle n_i \rangle$ – voir (12.a)). A cause de la structure de V , l'oscillateur dans l'état fondamental $|0\rangle$ en présence du réservoir dans l'état $|0_1 0_2 \dots 0_i \dots\rangle$ ne peut effectuer aucune transition. Le déplacement radiatif spontané $\hbar\Delta_0$ de $|0\rangle$ est donc nul. Par contre, si l'oscillateur est dans l'état $|1\rangle$, le couplage V donné en (3) autorise des

transitions où \mathcal{A} descend de $|1\rangle$ à $|0\rangle$ tandis qu'un oscillateur i de \mathcal{R} passe de $|0_i\rangle$ à $|1_i\rangle$. Le déplacement $\hbar\Delta$ n'est autre que le déplacement radiatif associé à un tel processus (sommé sur tous les oscillateurs i). Le même raisonnement s'applique à un oscillateur initialement dans l'état $|n\rangle$ et qui passe de $|n\rangle$ à $|n-1\rangle$, tandis qu'un oscillateur i passe de $|0_i\rangle$ à $|1_i\rangle$. Comme $|\langle n-1|b|n\rangle|^2 = n|\langle 0|b|1\rangle|^2$, on en déduit que le déplacement radiatif spontané de l'état $|n\rangle$ vaut $n\hbar\Delta$. Finalement, la différence entre les déplacements $\hbar\Delta_n$ et $\hbar\Delta_{n-1}$ de deux niveaux consécutifs est indépendante de n et vaut $\hbar\Delta$, ce qui montre que les niveaux perturbés de l'oscillateur restent équidistants avec une fréquence apparente $\omega_0 + \Delta$. C'est ce qu'exprime le quatrième terme de (14).

Considérons enfin le dernier paramètre Δ' . Comme il dépend des $\langle n_i \rangle$ (voir (12.b)), il représente un déplacement radiatif dû au rayonnement présent. Calculons un tel déplacement pour le niveau $|1\rangle$. Un processus d'émission stimulée faisant descendre l'oscillateur \mathcal{A} de $|1\rangle$ à $|0\rangle$ et faisant apparaître un quantum supplémentaire $\hbar\omega_i$ dans l'oscillateur i déplace le niveau $|1\rangle$ de la quantité $\hbar\Delta'$ donnée en (12.b). Il ne faut pas oublier cependant les processus d'absorption qui font monter \mathcal{A} de $|1\rangle$ à $|2\rangle$ en faisant disparaître un quantum $\hbar\omega_i$. Un tel processus déplace le niveau $|1\rangle$ de $-2\hbar\Delta'$, le signe - provenant du fait que le défaut d'énergie dans l'état intermédiaire vaut maintenant $\hbar(\omega_i - \omega_0)$, au lieu de $\hbar(\omega_0 - \omega_i)$ et le facteur 2 de $|\langle 2|b^+|1\rangle|^2$. Finalement, le déplacement global du niveau $|1\rangle$ vaut $+\hbar\Delta' - 2\hbar\Delta' = -\hbar\Delta'$. Il en est de même du niveau $|n\rangle$ qui est déplacé de $n\hbar\Delta' - (n+1)\hbar\Delta' = -\hbar\Delta'$. Il apparaît ainsi que les processus d'absorption et d'émission stimulée déplacent *en bloc* tous les niveaux de \mathcal{A} et ne changent donc pas la fréquence de l'oscillateur. C'est ce qui explique pourquoi Δ' n'apparaît pas dans (14).

b) EVOLUTION DE QUELQUES VALEURS MOYENNES

Calculons tout d'abord $d\langle b \rangle / dt$, ce qui permet d'étudier comment s'amortissent la position moyenne et la vitesse moyenne de \mathcal{A} . Comme $\langle b \rangle = Tr(\sigma b)$

$$\frac{d}{dt} \langle b \rangle = \frac{d}{dt} Tr(\sigma b) = Tr \left(\frac{d\sigma}{dt} b \right) \quad (17)$$

Reportons alors (14) dans le dernier terme de (17). En utilisant l'invariance d'une trace dans une permutation circulaire et le commutateur $[b, b^+] = 1$, on obtient après un calcul sans difficulté

$$\frac{d}{dt} \langle b \rangle = - \left[i(\omega_0 + \Delta) + \frac{\Gamma}{2} \right] \langle b \rangle \quad (18)$$

Sous l'effet du couplage de \mathcal{A} avec \mathcal{R} , l'oscillation de $\langle b \rangle$ subit donc un déplacement de fréquence Δ et un amortissement de taux $\Gamma/2$.

Le résultat (18) appelle deux commentaires. Tout d'abord, le taux d'amortissement de l'oscillateur ne dépend pas de son excitation initiale, contrairement à ce que pourrait laisser croire la figure 1, montrant que les taux de transition entre niveaux de \mathcal{A} croissent avec l'énergie de ces niveaux. Ensuite, l'amortissement ne dépend que de Γ et non de Γ' . Pour essayer de comprendre ces deux points, écrivons l'équation d'évolution de la cohérence σ_{n+1n} qui intervient dans $\langle b \rangle = \sum_n \sqrt{n+1} \sigma_{n+1n}$. Par projection de (14) sur $\langle n+1 |$ et $|n \rangle$, il vient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{n+1n} = & -\frac{1}{2} (2n+1) \Gamma \sigma_{n+1n} - \\ & - 2(n+1) \Gamma' \sigma_{n+1n} - i(\omega_0 + \Delta) \sigma_{n+1n} + \\ & + \sqrt{(n+1)(n+2)} (\Gamma + \Gamma') \sigma_{n+2n+1} + \sqrt{n(n+1)} \Gamma' \sigma_{nn-1} \end{aligned} \quad (19)$$

Les deux premiers termes de (19) décrivent effectivement une destruction de la cohérence entre $|n+1\rangle$ et $|n\rangle$ due à des processus qui vident les niveaux n et $n+1$. Le coefficient global de σ_{n+1n} est bien, conformément à (C.17), la demi-somme de tous les taux de transition qui partent de $|n\rangle$ et $|n+1\rangle$ et qui croissent tous avec n . Par contre, les deux derniers termes de (19) décrivent des transferts de cohérence, alimentant σ_{n+1n} à partir de σ_{n+2n+1} par émission spontanée et induite, et à partir de σ_{nn-1} par absorption. Ces termes de transfert n'existent que parce que les niveaux de \mathcal{A} sont équidistants : les cohérences σ_{n+1n} , σ_{n+2n+1} et σ_{nn-1} évoluent alors à la même fréquence (voir fin du paragraphe C-2). Ce sont ces transferts de cohérence qui sont à l'origine du fait que $\langle b \rangle$ s'amortit avec un taux indépendant de Γ' et beaucoup plus faible que le coefficient de σ_{n+1n} dans (19) (*).

Calculons enfin l'évolution de $\langle b^+ b \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle b^+ b \rangle = Tr \left(\frac{d\sigma}{dt} b^+ b \right) \quad (20)$$

(*) Un tel résultat établi à partir de l'équation pilote rappelle celui de l'exercice 15. L'équidistance entre les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique est à l'origine d'interférences entre les diverses amplitudes associées à une cascade radiative et entraîne que la distribution spectrale du rayonnement émis est indépendante de l'excitation initiale de l'oscillateur.

La même méthode de calcul que celle conduisant à (18) donne

$$\frac{d}{dt} \langle b^+ b \rangle = -\Gamma \langle b^+ b \rangle + \Gamma' \quad (21)$$

Les processus d'émission spontanée amortissent donc l'énergie moyenne $\hbar\omega_0 \langle b^+ b \rangle$ de \mathcal{A} avec un taux Γ alors que les processus d'absorption et d'émission stimulée l'alimentent en énergie avec un taux Γ' . En régime stationnaire

$$\langle b^+ b \rangle_{st} = \frac{\Gamma'}{\Gamma} \quad (22)$$

Si le réservoir \mathcal{R} est en équilibre thermodynamique, l'utilisation de (15) montre alors que

$$\langle b^+ b \rangle_{st} = \langle n(\omega_0) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1} \quad (23)$$

qui est bien la valeur correspondant à un oscillateur \mathcal{A} lui aussi en équilibre thermodynamique.

4. Equation pilote dans une base d'états cohérents

En mécanique statistique classique, l'état de l'oscillateur \mathcal{A} serait défini par la donnée d'une distribution de probabilité dans l'espace des phases. Quantiquement, les relations d'incertitude entre x et p empêchent de définir un état qui correspondrait à un point de l'espace des phases. On peut cependant remplacer ces points par des états d'incertitude minimum, comme les états cohérents, et développer σ sous forme d'une somme de projecteurs sur de tels états. L'équation d'évolution de la quasi-probabilité décrivant σ sur une telle base a une forme simple d'équation de Fokker-Planck. On peut l'intégrer exactement et déterminer ainsi de nombreuses propriétés de l'oscillateur harmonique amorti.

a) BREFS RAPPELS SUR LES ÉTATS COHÉRENTS ET SUR LA PRÉSENTATION P_N DE L'OPÉRATEUR DENSITÉ (*)

Les états cohérents de l'oscillateur \mathcal{A} sont les états propres de l'opérateur d'annihilation b , de valeur propre β

$$b |\beta\rangle = \beta |\beta\rangle \quad (24.a)$$

$$\langle \beta | b^+ = \beta^* \langle \beta | \quad (24.b)$$

(*) Pour plus de détails, voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », § C-4 du chapitre III et exercices 5 et 6 du complément D_{III} .

Ils peuvent être également écrits sous la forme

$$|\beta\rangle = e^{-\beta\beta^*/2} e^{\beta b^+} |0\rangle \quad (25)$$

puisque le développement de la seconde exponentielle redonne pour $|\beta\rangle$ l'expression bien connue

$$|\beta\rangle = e^{-\beta\beta^*/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (26)$$

L'opérateur densité σ admet une représentation P_N (dite également « représentation de Glauber »), s'il peut être écrit sous la forme :

$$\sigma = \int d^2\beta P_N(\beta, \beta^*) |\beta\rangle \langle \beta| \quad (27)$$

où $d^2\beta = d\Re\beta d\Im\beta$. L'intérêt de la fonction $P_N(\beta, \beta^*)$ est qu'elle ressemble beaucoup, par certains côtés, à une distribution de probabilité classique. L'hermiticité de $\sigma (\sigma = \sigma^+)$ et sa normalisation ($\text{Tr } \sigma = 1$) entraînent en effet que $P_N(\beta, \beta^*)$ est une fonction réelle et normée. Par ailleurs, on peut montrer aisément que la valeur moyenne dans l'état σ de toute fonction de b et b^+ rangée dans l'ordre normal (c'est-à-dire avec tous les b^+ à gauche des b) s'exprime très simplement en fonction de $P_N(\beta, \beta^*)$ (c'est là l'origine de l'indice N pour normal de P_N) :

$$\text{Tr } \sigma(b^+)^l (b)^m = \int d^2\beta (\beta^*)^l (\beta)^m P_N(\beta, \beta^*) \quad (28)$$

La fonction $P_N(\beta, \beta^*)$ peut cependant prendre des valeurs négatives et des relations aussi simples que (28) ne restent pas valables pour des ordres autres que l'ordre normal. C'est la raison pour laquelle $P_N(\beta, \beta^*)$ est en fait une distribution de « quasi-probabilité » et non de probabilité.

Remarque

D'autres distributions de quasi-probabilité sont également utilisées. Par exemple, la distribution $P_A(\beta, \beta^*)$ donne des expressions aussi simples que (28) pour les valeurs moyennes de produits d'opérateurs $b^m (b^+)^l$ rangés dans l'ordre antinormal. De même, la distribution de Wigner $W(\beta_1, \beta_2)$ est adaptée au calcul des valeurs moyennes de produits symétrisés des opérateurs hermitiques $b_1 = (b + b^+)/\sqrt{2}$ et $b_2 = i(b^+ - b)/\sqrt{2}$. On peut montrer (*) que P_A et W s'expriment en

(*) Voir par exemple H. Haken, Rev. Mod. Phys. 47, 67 (1975), en particulier la page 116, et les références citées.

fonction de P_N

$$P_A(\beta, \beta^*) = \frac{1}{\pi} \int d^2\gamma P_N(\gamma, \gamma^*) \exp(-|\beta - \gamma|^2) \quad (29)$$

$$W(\beta_1, \beta_2) = \frac{2}{\pi} \int d^2\gamma P_N(\gamma, \gamma^*) \exp(-2|\gamma - \beta_1 - i\beta_2|^2) \quad (30)$$

b) EQUATION D'ÉVOLUTION POUR $P_N(\beta, \beta^*, t)$

Lorsque le développement (27) est reporté dans l'équation pilote (14), on voit apparaître des termes de la forme $b|\beta\rangle\langle\beta|$ et $|\beta\rangle\langle\beta|b^+$ qui, d'après (24), valent $\beta|\beta\rangle\langle\beta|$ et $\beta^*|\beta\rangle\langle\beta|$ respectivement. D'autres termes, de la forme $b^+|\beta\rangle\langle\beta|$ et $|\beta\rangle\langle\beta|b$, apparaissent également et nous expliquons maintenant comment les calculer. Considérons β et β^* comme des variables indépendantes (au lieu de $\Re\beta$ et $\Im\beta$) et dérivons par rapport à β ou β^* l'expression

$$|\beta\rangle\langle\beta| = e^{-\beta\beta^*} e^{\beta b^+} |0\rangle\langle 0| e^{\beta^* b} \quad (31)$$

déduite de (25). Il vient

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial\beta} |\beta\rangle\langle\beta| = -\beta^*|\beta\rangle\langle\beta| + b^+|\beta\rangle\langle\beta| \\ \frac{\partial}{\partial\beta^*} |\beta\rangle\langle\beta| = -\beta|\beta\rangle\langle\beta| + |\beta\rangle\langle\beta|b \end{cases} \quad (32)$$

d'où l'on déduit

$$\begin{aligned} b^+|\beta\rangle\langle\beta| &= \left(\beta^* + \frac{\partial}{\partial\beta}\right) |\beta\rangle\langle\beta| \\ |\beta\rangle\langle\beta|b &= \left(\beta + \frac{\partial}{\partial\beta^*}\right) |\beta\rangle\langle\beta| \end{aligned} \quad (33)$$

Montrons maintenant comment il est possible de transformer chacun des termes obtenus après le report de (27) dans (14). Considérons par exemple les termes en $b^+b\sigma$ de (14). Ils s'écrivent, compte tenu de (24) et (33)

$$\begin{aligned} b^+b\sigma &= \int d^2\beta P_N(\beta, \beta^*) b^+b |\beta\rangle\langle\beta| \\ &= \int d^2\beta P_N(\beta, \beta^*) \beta b^+ |\beta\rangle\langle\beta| \\ &= \int d^2\beta \beta P_N(\beta, \beta^*) \left(\beta^* + \frac{\partial}{\partial\beta}\right) |\beta\rangle\langle\beta| \end{aligned} \quad (34)$$

En intégrant par parties le terme en $\partial/\partial\beta$ et en supposant que

$P_N(\beta, \beta^*)$ s'annule à l'infini, on obtient alors

$$b^+ b \sigma = \int d^2\beta \left\{ \beta^* \beta P_N(\beta, \beta^*) - \frac{\partial}{\partial \beta} [\beta P_N(\beta, \beta^*)] \right\} |\beta\rangle \langle \beta| \quad (35)$$

Des calculs analogues peuvent être faits pour tous les autres termes de (14). En égalant à zéro le coefficient de $|\beta\rangle \langle \beta|$ dans l'intégrale sur $d^2\beta$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_N(\beta, \beta^*, t) &= \left(\frac{\Gamma}{2} + i \tilde{\omega}_0 \right) \frac{\partial}{\partial \beta} [\beta P_N(\beta, \beta^*, t)] + \\ &+ \left(\frac{\Gamma}{2} - i \tilde{\omega}_0 \right) \frac{\partial}{\partial \beta^*} [\beta^* P_N(\beta, \beta^*, t)] + \\ &+ \Gamma' \frac{\partial^2}{\partial \beta \partial \beta^*} P_N(\beta, \beta^*, t) \end{aligned} \quad (36)$$

où l'on a posé $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 + \Delta$.

c) DISCUSSION PHYSIQUE

Les deux premiers termes de (36), en $\partial/\partial\beta$ et $\partial/\partial\beta^*$, sont des termes de dérive décrivant comment la distribution de quasi-probabilité se déplace au cours du temps. Le dernier terme, en $\partial^2/\partial\beta\partial\beta^*$, est un terme de diffusion décrivant l'élargissement de la distribution.

Les équations du type (36) sont appelées équations de Fokker-Planck et sont utilisées de façon très générale pour décrire de façon approchée l'évolution de certaines distributions de probabilité (voir par exemple l'équation (E.53)). Il faut noter que, pour le modèle simple étudié ici, l'équation de Fokker-Planck a été établie sans approximation à partir de l'équation pilote.

On peut vérifier par substitution que la fonction

$$\frac{1}{\pi \langle n(\omega_0) \rangle (1 - e^{-\Gamma t})} \exp - \frac{[\beta - \beta_0 e^{-(\frac{\Gamma}{2} + i \tilde{\omega}_0)t}] [\beta^* - \beta_0^* e^{-(\frac{\Gamma}{2} - i \tilde{\omega}_0)t}]}{\langle n(\omega_0) \rangle (1 - e^{-\Gamma t})}, \quad (37)$$

qui se réduit à $\delta(\beta - \beta_0) \delta(\beta^* - \beta_0^*)$ pour $t = 0$, est solution de (36) et est donc la fonction de Green de cette équation. C'est une gaussienne centrée en un point du plan complexe qui décrit, à la vitesse angulaire $-\tilde{\omega}_0$, une spirale de rayon décroissant exponentiellement avec le temps, la largeur de la gaussienne croissant avec le temps, de la valeur 0 pour $t = 0$ à la valeur $\sqrt{\langle n(\omega_0) \rangle}$ pour $t = \infty$. Pour $t \rightarrow \infty$, l'expres-

sion (37) donne la représentation P_N de l'état d'équilibre

$$P_N^{\text{eq}}(\beta, \beta^*) = \frac{1}{\pi \langle n(\omega_0) \rangle} \exp \left[-\frac{\beta^* \beta}{\langle n(\omega_0) \rangle} \right] \quad (38)$$

$\langle n(\omega_0) \rangle$ étant donné par (E.17) s'il s'agit d'un équilibre thermodynamique.

Remarque

Notons une propriété remarquable de $P_N(\beta, \beta^*)$: si $\langle n(\omega_0) \rangle = 0$, c'est-à-dire si le réservoir est dans l'état fondamental $|0\rangle$, la fonction de Green (37) reste une fonction delta de largeur nulle quel que soit t . Un tel résultat exprime que, si un oscillateur matériel est initialement dans un état cohérent (dont la représentation P_N est une fonction delta), sans aucun photon incident, il continue à rester dans un état cohérent lorsqu'il se désexcite par émission spontanée.

RÉFÉRENCES

W.H. Louisell and J.H. Marburger, I.E.E.E. J. Quant. Elec. QE3, 348 (1967) et les références qui y sont citées. Louisell, chapitre VI. Glauber, §§ 8 et 9.

COMPLÉMENT C_{IV}

ÉQUATIONS DE LANGEVIN QUANTIQUES POUR UN SYSTÈME PHYSIQUE SIMPLE

L'équation pilote établie dans ce chapitre décrit, dans le point de vue de Schrödinger, comment un petit système \mathcal{A} évolue sous l'effet de son couplage avec un grand réservoir \mathcal{R} . Le but de ce complément est de reprendre le même problème dans le point de vue de Heisenberg. Pour simplifier au maximum les calculs, nous nous limiterons au modèle simple, introduit dans le complément B_{IV} , d'un oscillateur harmonique \mathcal{A} couplé à un réservoir \mathcal{R} d'oscillateurs harmoniques. Notre objectif est double : tout d'abord, montrer que les équations de Heisenberg des observables de \mathcal{A} peuvent être mises sous une forme qui rappelle les équations de Langevin du mouvement Brownien classique ; utiliser ensuite ces équations de Heisenberg-Langevin pour analyser les relations qui existent entre *fluctuations et dissipation* et calculer les *fonctions de corrélation* des observables de \mathcal{A} .

Nous commençons (§ 1) par rappeler les grandes lignes de la théorie classique du mouvement Brownien et par analyser l'équation de Langevin utilisée pour décrire un tel mouvement. Nous établissons ensuite (§ 2) les équations de Heisenberg-Langevin quantiques relatives au modèle simple du complément B_{IV} et discutons sur ces équations le théorème fluctuation-dissipation ainsi que le théorème de régression quantique relatif aux fonctions de corrélation de \mathcal{A} .

1. Rappels sur la théorie classique du mouvement Brownien

a) EQUATION DE LANGEVIN

Une grosse particule, de masse M , d'impulsion \mathbf{p} , est plongée dans un fluide homogène de particules plus légères avec lesquelles elle subit des collisions incessantes qui confèrent à son mouvement un caractère erratique. L'équation introduite par Langevin pour décrire phénoménologiquement un tel mouvement s'écrit (pour une composante p de \mathbf{p}) :

$$\frac{d}{dt} p(t) = -\gamma p(t) + F(t) \quad (1)$$

La force totale agissant sur la particule est séparée en deux parties. La première, $-\gamma p(t)$, décrit l'effet cumulatif des collisions qui est d'amortir l'impulsion de la particule avec un coefficient de friction

γ . La seconde est une force fluctuante $F(t)$, appelée force de Langevin, qui décrit les fluctuations de la force instantanée autour de sa valeur moyenne. Dans l'équation (1), $F(t)$ est considérée comme une force extérieure, indépendante de $p(t)$, décrite par une fonction aléatoire stationnaire de t , satisfaisant aux propriétés suivantes :

(i) La valeur moyenne de $F(t)$ est nulle :

$$\overline{F(t)} = 0 \quad (2.a)$$

(ii) La fonction de corrélation de la force de Langevin, qui décrit la dynamique des fluctuations de $F(t)$, est de la forme :

$$\overline{F(t)F(t')} = 2 D g(t - t') \quad (2.b)$$

où D est un coefficient (qui sera interprété plus loin) et $g(t - t')$ une fonction paire de $t - t'$, de largeur τ_c et dont l'intégrale sur $t - t'$ est égale à 1. Les propriétés de parité et d'invariance par translation dans le temps de g résultent du fait que $\overline{F(t)F(t')}$ est une fonction d'autocorrélation classique stationnaire. Le temps de corrélation τ_c de $F(t)$ est de l'ordre du temps de collision entre la particule Brownienne et une particule du fluide. Il est beaucoup plus court que le temps d'amortissement $T_R = \gamma^{-1}$ de $\overline{p(t)}$, car il faut de nombreuses collisions pour changer appréciablement l'impulsion de la particule lourde.

$$\tau_c \ll T_R = \gamma^{-1} \quad (3)$$

Vis-à-vis des fonctions de $t - t'$ variant lentement à l'échelle de τ_c , $g(t - t')$ apparaît donc comme une fonction delta, de sorte que la fonction de corrélation (2.b) peut être approximée par

$$\overline{F(t)F(t')} \simeq 2 D \delta(t - t') \quad (4)$$

b) INTERPRÉTATION DU COEFFICIENT D. LIEN ENTRE FLUCTUATIONS ET DISSIPATION

Etudions l'évolution de $p(t)$ à partir d'une valeur initiale bien définie $p(t_0) = p_0$. L'intégration de (1) donne :

$$p(t) = p_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{-\gamma(t-t')} \quad (5)$$

Compte tenu de (2.a), nous obtenons alors pour $\overline{p(t)}$

$$\overline{p(t)} = p_0 e^{-\gamma(t-t_0)} \quad (6)$$

L'impulsion moyenne s'amortit donc avec un taux γ . Calculons

maintenant l'évolution de la variance $\sigma_p^2(t)$ de $p(t)$:

$$\sigma_p^2(t) = \overline{[p(t)]^2} - \overline{[p(t)]}^2 = \overline{[p(t) - \overline{p(t)}]^2} \quad (7)$$

D'après (5) et (6),

$$p(t) - \overline{p(t)} = \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{-\gamma(t-t')} \quad (8)$$

de sorte que :

$$\sigma_p^2(t) = \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \overline{F(t')F(t'')} e^{-\gamma(t-t')} e^{-\gamma(t-t'')} \quad (9)$$

Les deux exponentielles de (9) varient lentement à l'échelle de τ_c . L'utilisation de (4) donne alors (pour $t - t_0 \gg \tau_c$) :

$$\sigma_p^2(t) = 2D \int_{t_0}^t dt' e^{-2\gamma(t-t')} = \frac{D}{\gamma} [1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}] \quad (10)$$

L'équation (10) montre que $\sigma_p^2(t)$, c'est-à-dire la dispersion sur p , commence par croître linéairement avec $t - t_0$:

$$\sigma_p^2(t) \approx 2D(t - t_0) \quad \text{pour } \tau_c \ll t - t_0 \ll \gamma^{-1} \quad (11)$$

Un tel résultat fait apparaître D comme un *coefficient de diffusion* de l'impulsion.

Aux temps longs ($t - t_0 \gg \gamma^{-1}$), $\sigma_p^2(t)$ tend d'après (10) vers une valeur d'équilibre, D/γ , indépendante de t , alors que $\overline{p(t)}$ tend d'après (6) vers zéro. On en déduit d'après (7) que la valeur d'équilibre de $\overline{p^2}$ est

$$\overline{p^2} = \frac{D}{\gamma} \quad (12)$$

Si le fluide est en équilibre thermodynamique, cette valeur d'équilibre doit satisfaire

$$\frac{\overline{p^2}}{2M} = \frac{1}{2} k_B T \quad (13)$$

L'identification de (12) et (13) donne alors la relation d'Einstein

$$D = M k_B T \gamma \quad (14)$$

établissant un lien entre le coefficient de diffusion D caractérisant les *fluctuations* de la force de Langevin agissant sur p et le coefficient de friction γ caractérisant la force de *dissipation* agissant sur cette même

variable p . Rappelons que, d'après (11), D apparaît également comme le coefficient de diffusion de p .

Remarque

Soit

$$\delta p(t) = p(t_0 + \delta t) - p(t_0) = p(t_0 + \delta t) - p_0 \quad (15)$$

l'accroissement de $p(t)$ entre t_0 et $t_0 + \delta t$ avec $\tau_c \ll \delta t \ll \gamma^{-1}$. Les équations (6) et (11) donnent

$$\overline{\delta p(t)} = p_0 e^{-\gamma \delta t} - p_0 \approx -p_0 \gamma \delta t \quad (16)$$

$$\overline{[\delta p(t)]^2} = \overline{[\delta p(t)]^2} - \overline{[\delta p(t)]^2} = 2 D \delta t \quad (17)$$

Comme $\overline{[\delta p(t)]^2}$ varie en $p_0^2 \gamma^2 \delta t^2$ d'après (16) et est donc négligeable devant $D \delta t$, on peut écrire (17) sous la forme

$$\overline{[\delta p(t)]^2} = 2 D \delta t \quad (18)$$

Les équations (16) et (18) donnent les moments d'ordre 1 et 2 de l'accroissement δp de p sur un temps court.

c) ETUDE DE QUELQUES FONCTIONS DE CORRÉLATION

Faisons tendre t_0 vers moins l'infini dans (5). La fonction aléatoire $p(t)$ a alors perdu tout souvenir des conditions initiales et s'écrit à un instant t' :

$$p(t') = \int_{-\infty}^{t'} dt'' F(t'') e^{-\gamma(t' - t'')} \quad (19)$$

a) *Fonction de corrélation impulsion - force de Langevin*

Multiplions les deux membres de (19) par $F(t)$ et prenons la valeur moyenne. Il vient :

$$\overline{p(t')F(t)} = \int_{-\infty}^{t'} dt'' \overline{F(t'')F(t)} e^{-\gamma(t' - t'')} \quad (20)$$

Si t est dans le futur de t' et si $t - t' \gg \tau_c$, on a dans (20) $t - t'' \gg \tau_c$ (puisque $t'' < t'$), de sorte que $\overline{F(t'')F(t)}$ est nul

$$\overline{p(t')F(t)} = 0 \quad \text{si} \quad t - t' \gg \tau_c \quad (21)$$

L'équation (21) exprime que $p(t')$, qui dépend de la force de Langevin dans le passé de t' , ne peut être corrélé avec la force de Langevin $F(t)$ à un instant t dans le futur de t' si $t - t' \gg \tau_c$.

Si t est dans le passé de t' et si $t' - t \gg \tau_c$, on peut utiliser (4) et

l'équation (20) donne alors :

$$\overline{p(t')F(t)} = 2D e^{-\gamma(t'-t)} \quad \text{si} \quad t' - t \gg \tau_c \quad (22)$$

Enfin, pour t voisin de t' ($|t - t'| \leq \tau_c$), $\overline{p(t')F(t)}$ varie très rapidement entre $2D$ et 0 sur un intervalle de largeur τ_c , en prenant une valeur égale à D pour $t = t'$, compte tenu de l'équation (20) écrite pour $t' = t$ et du caractère pair de $\overline{F(t')F(t)}$.

Tous ces résultats sont regroupés sur la figure 1 qui représente les variations avec t de $\overline{p(t')F(t)}$. Le point important, qui nous servira pour la suite, est que $p(t')$ est décorrélé de $F(t)$ si $t \geq t'$, sauf dans un petit intervalle de largeur τ_c au voisinage de $t = t'$, où $\overline{p(t')F(t)}$ reste fini et de l'ordre de D .

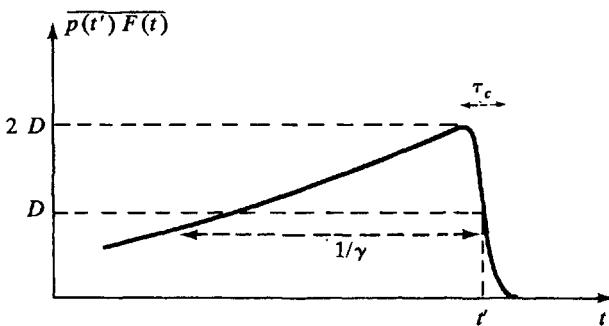


Figure 1. Variations avec t de $\overline{p(t')F(t)}$.

b) Fonction d'autocorrélation de l'impulsion

Multiplions les deux membres de (1) par $p(t')$ et prenons la valeur moyenne. Il vient

$$\frac{d}{dt} \overline{p(t)p(t')} = -\gamma \overline{p(t)p(t')} + \overline{F(t)p(t')} \quad (23)$$

Le deuxième terme du second membre de (23) peut être négligé pour $t \geq t'$. En effet, à partir de l'instant initial $t = t'$ pour lequel $\overline{p(t)p(t')}$ vaut p^2 , ce terme décroît d'une valeur D à zéro sur un intervalle de l'ordre de τ_c (voir figure 1). Lors de l'intégration de (23) pour $t \geq t'$, il contribuera de la quantité $\int_{t'}^t dt'' \overline{F(t'')p(t')}$ qui, d'après les considérations précédentes, vaut au maximum $D\tau_c$. D'après (3), cette quantité est petite devant $D\gamma^{-1}$ qui n'est autre que p^2 , d'après (12). En définitive, le dernier terme de (23) n'apporte, pour $t \geq t'$,

les considérations précédentes, vaut au maximum $D\tau_c$. D'après (3), cette quantité est petite devant $D\gamma^{-1}$ qui n'est autre que p^2 , d'après (12). En définitive, le dernier terme de (23) n'apporte, pour $t \geq t'$,

qu'une petite correction à $\overline{p(t)p(t')}$; $\overline{p(t)p(t')}$ est donc solution de l'équation

$$t \geq t' \quad \frac{d}{dt} \overline{p(t)p(t')} = -\gamma \overline{p(t)p(t')} \quad (24)$$

On trouve ainsi que $\overline{p(t)p(t')}$ décroît exponentiellement avec $t - t'$ à partir d'une valeur initiale donnée par (12). Comme $\overline{p(t)p(t')}$ est une fonction d'autocorrélation et est donc paire en $t - t'$, il vient finalement

$$\overline{p(t)p(t')} = \overline{p^2} e^{-\gamma|t-t'|} \quad (25)$$

L'équation (25) exprime que les corrélations entre $p(t)$ et $p(t')$ décroissent, c'est-à-dire encore « régressent », de la même manière que la valeur moyenne $\overline{p(t)}$, qui obéit à l'équation

$$\frac{d}{dt} \overline{p(t)} = -\gamma \overline{p(t)} \quad (26)$$

analogue à (24).

On aurait pu aboutir directement à l'expression (25) à partir de (19) et de (4). La dérivation présentée ici a l'avantage de se généraliser en théorie quantique et de conduire au théorème de « régression quantitative » (voir § 2-g ci-dessous).

Remarque

L'effet de la correction introduite par le dernier terme de (23) est « d'arrondir » le point anguleux de (25) en $t = t'$ et de faire partir $\overline{p(t)p(t')}$ avec une tangente horizontale en ce point. Pour établir aisément un tel résultat, considérons les transformées de Fourier $\tilde{p}(\omega)$ et $\tilde{F}(\omega)$ de $p(t)$ et $F(t)$. L'équation (1) entraîne que

$$|\tilde{p}(\omega)|^2 = \frac{|\tilde{F}(\omega)|^2}{\gamma^2 + \omega^2} \quad (27)$$

Or, d'après le théorème de Wiener-Kinchine, les transformées de Fourier de $|\tilde{p}(\omega)|^2$ et $|\tilde{F}(\omega)|^2$ sont (à un coefficient multiplicatif près) les fonctions d'autocorrélation $\overline{p(t)p(t')}$ et $\overline{F(t)F(t')}$. D'après (27), $\overline{p(t)p(t')}$ est donc le produit de convolution de la transformée de Fourier de $(\gamma^2 + \omega^2)^{-1}$, c'est-à-dire $e^{-\gamma|t-t'|}$, par la transformée de Fourier de $|\tilde{F}(\omega)|^2$, c'est-à-dire $g(t - t')$. Comme la largeur τ_c de $g(t - t')$ est beaucoup plus petite que celle, γ^{-1} , de $\exp(-\gamma|t - t'|)$, on retrouve bien que $\overline{p(t)p(t')}$ est pratiquement égal à $\exp(-\gamma|t - t'|)$, à des corrections en τ_c/T_R près qui arrondissent le point anguleux en $t = t'$ sur un intervalle de largeur τ_c .

2. Équations de Heisenberg-Langevin pour un oscillateur harmonique amorti

Nous reprenons maintenant le modèle, introduit dans le complément B_{IV} , d'un oscillateur harmonique \mathcal{A} (de fréquence ω_0 , d'opérateurs de création et d'annihilation b^+ et b) couplé à un réservoir d'oscillateurs i (de fréquence ω_i et d'opérateurs de création et d'annihilation a_i^+ et a_i). L'hamiltonien total H a pour expression :

$$H = H_A + H_R + V \\ = \hbar\omega_0(b^+b + \frac{1}{2}) + \sum_i \hbar\omega_i(a_i^+a_i + \frac{1}{2}) + \sum_i (g_i b^+ a_i + g_i^* b a_i^+) \quad (28)$$

où g_i est une constante de couplage.

a) EQUATIONS DE HEISENBERG COUPLÉES

L'équation de Heisenberg pour $b(t)$ s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} b(t) = [b(t), H] = \hbar\omega_0 b(t) + \sum_i g_i a_i(t) \quad (29)$$

Elle dépend des opérateurs $a_i(t)$ du réservoir dont l'équation d'évolution a une forme analogue

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_i(t) = [a_i(t), H] = \hbar\omega_i a_i(t) + g_i^* b(t) \quad (30)$$

Les évolutions des opérateurs d'annihilation $b(t)$ et $a_i(t)$ sont donc couplées entre elles par les équations linéaires (29) et (30). Il convient de noter que la simplicité de ces équations provient de la forme bilinéaire en b ou b^+ et a_i ou a_i^+ que nous avons choisie pour l'interaction V et du fait que les commutateurs $[b, b^+]$ et $[a_i, a_i^+]$ sont simplement égaux à 1. Nous étudierons dans le complément A_V le cas où l'oscillateur \mathcal{A} est remplacé par un système à deux niveaux. Le dernier terme de l'équation analogue à (29) est alors non linéaire car il dépend dans ce cas, non seulement des $a_i(t)$, mais aussi des opérateurs de \mathcal{A} .

Il sera commode pour la suite de poser :

$$b(t) = \hat{b}(t) e^{-i\omega_0 t} \quad (31.a)$$

$$a_i(t) = \hat{a}_i(t) e^{-i\omega_i t} \quad (31.b)$$

de manière que \hat{b} et \hat{a}_i n'évoluent que sous l'effet de V . Les équations

(29) et (30) deviennent alors

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}(t) = \sum_i g_i \hat{a}_i(t) e^{i(\omega_0 - \omega_i)t} \quad (32)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_i(t) = g_i^* \hat{b}(t) e^{i(\omega_i - \omega_0)t} \quad (33)$$

b) EQUATION DE LANGEVIN ET FORCE DE LANGEVIN QUANTIQUES

Intégrons formellement l'équation (33) sous la forme

$$\hat{a}_i(t) = \hat{a}_i(t_0) - \frac{i}{\hbar} g_i^* \int_{t_0}^t dt' \hat{b}(t') e^{i(\omega_i - \omega_0)t'} \quad (34)$$

et reportons le résultat obtenu dans (32). Il vient

$$\frac{d}{dt} \hat{b}(t) = - \int_0^{t-t_0} d\tau \kappa(\tau) \hat{b}(t-\tau) + \hat{F}(t) \quad (35)$$

où

$$\kappa(\tau) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau} \quad (36)$$

$$\hat{F}(t) = - \frac{i}{\hbar} \sum_i g_i \hat{a}_i(t_0) e^{i(\omega_0 - \omega_i)t} \quad (37)$$

Considérons tout d'abord la fonction $\kappa(\tau)$ donnée en (36). Comme \mathcal{R} est un réservoir, les fréquences ω_i des oscillateurs couvrent une plage très étendue. Par ailleurs, $|g_i|^2$ varie en général lentement avec ω_i . Il s'ensuit que l'ensemble des exponentielles de (36) se brouille très rapidement quand τ croît à partir de 0, de sorte que $\kappa(\tau)$ devient négligeable dès que $\tau \gg \tau_c$, où τ_c est le temps de corrélation du réservoir. Par ailleurs, $\hat{b}(t-\tau)$ varie beaucoup plus lentement avec τ , sur une échelle de temps $T_R \gg \tau_c$, où T_R est le temps d'amortissement de \mathcal{A} . On peut donc négliger la variation avec τ de $\hat{b}(t-\tau)$ devant celle de $\kappa(\tau)$ dans l'intégrale de (35), c'est-à-dire remplacer $\hat{b}(t-\tau)$ par $\hat{b}(t)$ qui peut être alors sorti de l'intégrale, ce qui fait apparaître (nous supposons $t-t_0 \gg \tau_c$)

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \kappa(\tau) d\tau &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{\eta \rightarrow 0_+} \sum_i |g_i|^2 \int_0^\infty e^{i(\omega_0 - \omega_i + i\eta)\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 \left\{ \pi \delta(\omega_0 - \omega_i) + i \mathcal{P} \frac{1}{\omega_0 - \omega_i} \right\} \\ &= \frac{\Gamma}{2} + i \Delta \end{aligned} \quad (38)$$

où Γ et $\hbar\Delta$ sont les paramètres introduits dans les expressions (11.a) et (12.a) du complément B_{IV} et décrivant respectivement le taux d'émission spontanée et le déplacement radiatif spontané de l'oscillateur. L'équation (35) peut donc être réécrite :

$$\frac{d}{dt} \hat{b}(t) = - \left(\frac{\Gamma}{2} + i \Delta \right) \hat{b}(t) + \hat{F}(t) \quad (39)$$

Pour montrer que l'équation (39) peut être considérée comme une équation de Langevin, il nous faut maintenant étudier les propriétés de l'opérateur $\hat{F}(t)$. D'après (37), $\hat{F}(t)$ est un opérateur de réservoir. A l'instant initial t_0 , où les deux points de vue de Schrödinger et de Heisenberg coïncident, nous supposons que l'opérateur densité du système global est factorisé sous la forme $\sigma_A \otimes \sigma_R$ où σ_R est donné par le mélange statistique des états $|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle$ avec des poids $p(n_1 n_2 \cdots n_i \cdots)$ (voir formule (E.8)). Comme $a_i(t_0)$ n'a pas d'éléments diagonaux dans l'état $|n_i\rangle$, il s'ensuit que :

$$\langle \hat{F}(t) \rangle = \text{Tr } \sigma_A \sigma_R F(t) = 0 \quad (40)$$

L'équation (39) donne donc en valeur moyenne

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}(t) \rangle = - \left(\frac{\Gamma}{2} + i \Delta \right) \langle \hat{b}(t) \rangle \quad (41)$$

ce qui coïncide bien avec l'équation (18) du complément B_{IV} (quand on revient de $\hat{b}(t)$ à $b(t)$ par (31.a)). Calculons maintenant les fonctions de corrélation de $\hat{F}(t)$ et $\hat{F}^+(t)$. Comme seuls les produits du type $a_i^+(t_0) a_i(t_0)$ ou $a_i(t_0) a_i^+(t_0)$ ont des valeurs moyennes non nulles dans l'état (E.8) du réservoir, égales respectivement à $\langle n_i \rangle$ et $\langle n_i \rangle + 1$, il vient

$$\langle \hat{F}(t') \hat{F}(t) \rangle = \langle \hat{F}^+(t') \hat{F}^+(t) \rangle = 0 \quad (42)$$

$$\langle \hat{F}^+(t') \hat{F}(t) \rangle = \sum_i \frac{1}{\hbar^2} |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i)(t - t')} \quad (43)$$

$$\langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t') \rangle = \sum_i \frac{1}{\hbar^2} |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{i(\omega_0 - \omega_i)(t - t')} \quad (44)$$

Comme plus haut, les sommes d'exponentielles apparaissant dans (43) et (44) se brouillent très vite dès que $|t - t'| \gg \tau_c$. Les moyennes à deux temps (43) et (44) sont donc des fonctions très étroites de $\tau = t - t'$. Appelons $2D_N$ et $2D_A$ les intégrales sur τ de ces fonctions entre $-\infty$ et $+\infty$

$$2D_N = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \langle \hat{F}^+(t - \tau) \hat{F}(t) \rangle \quad (45)$$

$$2 D_A = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t - \tau) \rangle \quad (46)$$

(les indices N et A sont relatifs à l'ordre normal ou antinormal de \hat{F}^+ et \hat{F}). D'après (43), (44) et les formules (11.a) et (11.b) du complément B_{IV} , ces intégrales valent

$$2 D_N = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau} = \Gamma' \quad (47)$$

$$2 D_A = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau} = \Gamma' + \Gamma \quad (48)$$

On peut donc réécrire (43) et (44) sous la forme

$$\langle \hat{F}^+(t) \hat{F}(t') \rangle = 2 D_N g_N(t - t') \quad (49)$$

$$\langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t') \rangle = 2 D_A g_A(t - t') \quad (50)$$

où $g_N(\tau)$ et $g_A(\tau)$ sont deux fonctions de τ , de largeur τ_c et d'intégrale égale à 1 (*).

Si nous supposons enfin que $\langle n_i \rangle$ ne dépend que de ω_i , on peut utiliser la relation (15) du complément B_{IV} , $\Gamma' = \Gamma \langle n(\omega_0) \rangle$, (où $\langle n(\omega_0) \rangle$ est le nombre moyen de quanta du réservoir de même fréquence ω_0 que \mathcal{A}), pour réécrire (47) et (48) sous la forme

$$2 D_N = \Gamma \langle n(\omega_0) \rangle \quad (51)$$

$$2 D_A = \Gamma (1 + \langle n(\omega_0) \rangle) \quad (52)$$

Les opérateurs \hat{F} et \hat{F}^+ peuvent donc bien être considérés comme des forces de Langevin fluctuant très rapidement autour d'une valeur moyenne nulle. Il faut bien noter cependant que ce sont ici des opérateurs ne commutant pas entre eux, comme le montre la différence entre (51) et (52).

c) LIEN ENTRE FLUCTUATIONS ET DISSIPATION

Les équations (51) et (52) établissent un lien quantitatif entre les fluctuations de \hat{F} et \hat{F}^+ , caractérisées par D_N et D_A , et l'amortissement Γ caractérisant la dissipation associée aux mouvements de b et b^+ . Si le réservoir est en équilibre thermodynamique, $\langle n(\omega_0) \rangle$ est égal

(*) Les fonctions g_N et g_A n'ont pas une parité bien définie en τ . Vis-à-vis des fonctions de τ variant sur des échelles de temps $T_R \gg \tau_c$, elles peuvent être considérées comme une somme de fonctions δ , δ' , δ'' ... A l'ordre le plus bas en τ_c/T_R , on peut les remplacer par une fonction $\delta(\tau)$.

à $[\exp(\hbar\omega_0/k_B T) - 1]^{-1}$ et l'expression (51) par exemple devient

$$2 D_N = \frac{\Gamma}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1}, \quad (53)$$

équation qui peut être considérée comme l'expression d'un théorème fluctuation-dissipation quantique. Contrairement à ce que nous avons fait dans le paragraphe 1-b plus haut, la relation (53) n'est pas déduite d'une équation phénoménologique, mais des équations de Heisenberg du mouvement. Elle est valable également quelles que soient les valeurs relatives de $\hbar\omega_0$ et $k_B T$. En particulier, si $\hbar\omega_0 \ll k_B T$, l'équation (53) devient

$$2 D_N = \frac{\Gamma k_B T}{\hbar\omega_0} \quad (54)$$

et fait bien apparaître, comme en (14), une proportionnalité entre D et $\Gamma k_B T$.

La relation (53) entre D_N et Γ a été déduite de (51), c'est-à-dire encore du calcul explicite de la moyenne à deux temps $\langle \hat{F}^+(t - \tau) \hat{F}(t) \rangle$ des forces de Langevin apparaissant dans l'expression (45) de $2 D_N$. Il est possible également de relier le coefficient D_N à la vitesse d'augmentation de la variance « croisée » de b^+ et b définie comme

$$\mathcal{V}_N(t) = \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t) \rangle - \langle \hat{b}^+(t) \rangle \langle \hat{b}(t) \rangle, \quad (55)$$

le coefficient D_A étant relié à la vitesse d'augmentation de la variance

$$\mathcal{V}_A(t) = \langle \hat{b}(t) \hat{b}^+(t) \rangle - \langle \hat{b}(t) \rangle \langle \hat{b}^+(t) \rangle \quad (56)$$

correspondant à l'ordre antinormal de b et b^+ . Un tel résultat, qui sera établi dans le paragraphe 2-e ci-dessous, généralise en quelque sorte la relation (11) démontrée plus haut à propos de l'équation de Langevin classique, et exprimant que la vitesse d'augmentation de la variance de p est proportionnelle à D .

Avant de calculer $d\mathcal{V}_N/dt$ et $d\mathcal{V}_A/dt$, nous allons commencer par établir quelques résultats relatifs aux moyennes à deux temps $\langle \hat{F}^+(t) \hat{b}(t') \rangle$ ou $\langle \hat{b}^+(t') \hat{F}(t) \rangle$, résultats qui nous seront utiles pour la suite.

d) MOYENNES À DEUX TEMPS MIXTES FAISANT INTERVENIR LES FORCES DE LANGEVIN ET LES OPÉRATEURS b ET b^+ DE \mathcal{A}

Intégrons l'équation (39) entre t_0 et t'

$$\hat{b}(t') = \hat{b}(t_0) e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta\right)(t' - t_0)} + \int_{t_0}^{t'} dt'' F(t'') e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta\right)(t' - t'')} \quad (57)$$

Pour $t_0 \rightarrow -\infty$, le premier terme de (57) est négligeable et on obtient alors, en multipliant les deux membres de (57) par $\hat{F}^+(t)$:

$$\langle \hat{F}^+(t)\hat{b}(t') \rangle = \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle \hat{F}^+(t)\hat{F}(t'') \rangle e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta\right)(t'' - t')} \quad (58)$$

Le même raisonnement que celui fait dans le paragraphe 1-c- α plus haut donne alors, pour les variations avec t de $\langle \hat{F}^+(t)\hat{b}(t') \rangle$, des résultats analogues à ceux représentés sur la figure 1. Pour $t > t'$, $\hat{F}^+(t)$ n'est pas corrélé avec $\hat{b}(t')$, sauf dans un intervalle de largeur τ_c au voisinage de $t = t'$; quand t est balayé autour de t' par valeurs croissantes, $\langle \hat{F}^+(t)\hat{b}(t') \rangle$ passe d'une valeur $2 D_N$ à 0 sur un intervalle de largeur τ_c . En particulier, la valeur pour $t = t'$ est donnée par

$$\begin{aligned} \langle \hat{F}^+(t)\hat{b}(t) \rangle &= \int_{t_0}^t dt'' \langle \hat{F}^+(t)\hat{F}(t'') \rangle e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta\right)(t - t'')} \\ &\approx \int_{t_0}^t dt'' \langle \hat{F}^+(t)\hat{F}(t'') \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

puisque $\langle \hat{F}^+(t)\hat{F}(t'') \rangle$ varie beaucoup plus vite avec $t - t''$ que l'exponentielle. De la même façon, on trouve

$$\langle \hat{b}^+(t)\hat{F}(t) \rangle \approx \int_{t_0}^t dt'' \langle \hat{F}^+(t'')\hat{F}(t) \rangle \quad (60)$$

Le changement de variable $\tau = t - t''$ et la stationnarité des moyennes à deux temps de \hat{F}^+ et \hat{F} permettent alors de regrouper (59) et (60) sous la forme

$$\langle \hat{b}^+(t)\hat{F}(t) \rangle + \langle \hat{F}^+(t)\hat{b}(t) \rangle = \int_{-(t-t_0)}^{+(t-t_0)} d\tau \langle \hat{F}^+(t-\tau)\hat{F}(t) \rangle = 2 D_N \quad (61)$$

Nous avons utilisé (45) et supposé $t - t_0 \gg \tau_c$.

e) VITESSES DE VARIATION DES VARIANCES \mathcal{V}_N ET \mathcal{V}_A

L'évolution de la valeur moyenne $\langle \hat{b}(t) \rangle$ est déterminée par l'équation de relaxation (41). L'équation d'évolution (39) de l'opérateur lui-même fait apparaître le même taux de variation, que nous appellerons terme de « dérive », et que nous noterons $\mathcal{D}(\hat{b}(t))$:

$$\mathcal{D}(\hat{b}(t)) = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta\right) \hat{b}(t) \quad (62)$$

La vitesse de variation de $\hat{b}(t)$ est alors simplement la somme du terme de dérive et de la force de Langevin

$$\frac{d}{dt} \hat{b}(t) = \mathcal{D}(\hat{b}(t)) + F(t) \quad (63)$$

De la même façon

$$\frac{d}{dt} \hat{b}^+(t) = \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) + F^+(t) \quad (64)$$

avec

$$\mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) = \left(-\frac{\Gamma}{2} + i\Delta \right) \hat{b}^+(t) \quad (65)$$

Considérons maintenant la vitesse d'évolution des opérateurs $\hat{b}^+ \hat{b}$ et $\hat{b} \hat{b}^+$ apparaissant dans les variances \mathcal{V}_N et \mathcal{V}_A définies en (55) et (56).

Pour $\hat{b}^+ \hat{b}$, on obtient tout d'abord

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\hat{b}^+(t) \hat{b}(t)) &= \left(\frac{d}{dt} \hat{b}^+(t) \right) \hat{b}(t) + \hat{b}^+(t) \left(\frac{d}{dt} \hat{b}(t) \right) = \\ &= \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) \hat{b}(t) + \hat{b}^+(t) \mathcal{D}(\hat{b}(t)) + \hat{F}^+(t) \hat{b}(t) + \hat{b}^+(t) \hat{F}(t) \end{aligned} \quad (66)$$

Prenons la valeur moyenne des deux membres de (66) et utilisons (61) (*). Il vient

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t) \rangle = \langle \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) \hat{b}(t) \rangle + \langle \hat{b}^+(t) \mathcal{D}(\hat{b}(t)) \rangle + 2 D_N \quad (67)$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de (62) et (65) :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t) \rangle = -\Gamma \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t) \rangle + 2 D_N \quad (68)$$

Par ailleurs, on a d'après (63) et (64)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t) \rangle \langle \hat{b}(t) \rangle &= \langle \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) \rangle \langle \hat{b}(t) \rangle + \langle \hat{b}(t) \rangle \langle \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)) \rangle \\ &= -\Gamma \langle \hat{b}^+(t) \rangle \langle \hat{b}(t) \rangle \end{aligned} \quad (69)$$

de sorte que, par soustraction, les équations (68) et (69) donnent, compte tenu de (55)

$$\frac{d}{dt} \mathcal{V}_N(t) = -\Gamma \mathcal{V}_N(t) + 2 D_N \quad (70)$$

(*) Le fait que les deux derniers termes de (66) aient, d'après (61), une valeur moyenne non nulle empêche de considérer leur somme comme la force de Langevin dans l'équation du mouvement de l'opérateur $\hat{b}^+(t) \hat{b}(t)$.

Des calculs analogues aux précédents permettent d'établir

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}(t) \hat{b}^+(t) \rangle = -\Gamma \langle \hat{b}(t) \hat{b}^+(t) \rangle + 2 D_A \quad (71)$$

et par suite

$$\frac{d}{dt} \mathcal{V}_A(t) = -\Gamma \mathcal{V}_A(t) + 2 D_A \quad (72)$$

Les variances ont donc tendance à croître linéairement avec t sous l'action des forces de Langevin, dont l'effet est représenté par les termes constants $2 D_N$ et $2 D_A$ de (70) et (72). Ces termes peuvent donc bien être considérés comme des coefficients de diffusion. L'amortissement Γ limite ce mouvement de diffusion et les valeurs d'équilibre de (70) et (72) redonnent les relations entre les coefficients D , Γ et la température (voir (53)).

Remarque

Le fait que D_N et D_A soient différents résulte de la nature quantique de $F(t)$ et $F^+(t)$ et est essentiel pour préserver la relation de commutation entre b et b^+ . En retranchant (68) de (71), on trouve en effet qu'une condition nécessaire pour que $\langle [\hat{b}(t), \hat{b}^+(t)] \rangle$ reste égal à 1 est que

$$D_A - D_N = \frac{\Gamma}{2}, \quad (73)$$

condition qui est bien satisfaite par (47) et (48).

f) GÉNÉRALISATION DE LA RELATION D'EINSTEIN

Revenons à l'équation (67). Comme l'opérateur $\hat{b}^+(t)\hat{b}(t)$ est un opérateur du petit système \mathcal{A} , on peut lui associer une vitesse de dérive $\mathcal{D}(\hat{b}^+ \hat{b})$ dont la valeur moyenne est par définition la vitesse de variation de $\langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle$.

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t)\hat{b}(t) \rangle = \langle \mathcal{D}(\hat{b}^+(t)\hat{b}(t)) \rangle \quad (74)$$

L'équation pilote de \mathcal{A} permet en principe de calculer $d\langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle / dt$ et donc d'en déduire $\mathcal{D}(\hat{b}^+ \hat{b})$. Ainsi, l'équation (21) du complément B_{IV} donne :

$$\mathcal{D}(\hat{b}^+(t)\hat{b}(t)) = -\Gamma \hat{b}^+(t)\hat{b}(t) + \Gamma' \quad (75)$$

L'équation (74) permet de réécrire (67) sous la forme

$$2 D_N = \langle \mathcal{D}(\hat{b}^+ \hat{b}) - \mathcal{D}(\hat{b}^+) \hat{b} - \hat{b}^+ \mathcal{D}(\hat{b}) \rangle \quad (76)$$

tous les opérateurs du second membre de (76) étant pris au même instant t . L'équation (76) peut être considérée comme une généralisation de la relation d'Einstein (14) entre D et Γ . Elle exprime le coefficient de diffusion D_N relatif à $\hat{b}^+ \hat{b}$ en fonction des vitesses de dérive qui décrivent l'amortissement de $\hat{b}^+ \hat{b}$, \hat{b}^+ et \hat{b} et qui peuvent être toutes calculées à partir de l'équation pilote.

Il apparaît aussi clairement sur (76) que le coefficient de diffusion D_N est associé uniquement à la partie *non hamiltonienne* des vitesses de dérive. Si l'on avait en effet, pour tout opérateur G_A de \mathcal{A}

$$\mathcal{D}(G_A) = \frac{i}{\hbar} [H, G_A] \quad (77)$$

2 D_N serait nul puisque

$$[H, \hat{b}^+ \hat{b}] - [H, \hat{b}^+] \hat{b} - \hat{b}^+ [H, \hat{b}] = 0 \quad (78)$$

C'est la raison pour laquelle les déplacements radiatifs des niveaux de \mathcal{A} , qui peuvent être décrits par un hamiltonien effectif, n'apparaissent pas dans l'expression des coefficients de diffusion.

Dans le cas particulier qui nous intéresse ici, il suffit de reporter (75), (62) et (65) dans (76) pour obtenir immédiatement l'expression (47) de D_N .

g) CALCUL DES MOYENNES À DEUX TEMPS DES OPÉRATEURS DE \mathcal{A} . THÉORÈME DE RÉGRESSION QUANTIQUE

Prenons l'adjoint de l'équation (39), multiplions les deux membres par $b(t')$ à droite et prenons la valeur moyenne. Il vient

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle = - \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Delta \right) \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle + \langle \hat{F}^+(t) \hat{b}(t') \rangle \quad (79)$$

Supposons $t \geq t'$. D'après ce que nous avons vu dans le paragraphe 2-d plus haut sur les moyennes à deux temps $\langle \hat{F}^+(t) \hat{b}(t') \rangle$, le dernier terme de (79) est nul sauf dans un petit intervalle de largeur τ_c au voisinage de $t = t'$, où il est de l'ordre de D_N . Il est donc tout à fait légitime de négliger un tel terme pour $t \geq t'$, l'erreur commise sur $\langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle$ étant de l'ordre de $D_N \tau_c$, c'est-à-dire d'après (51) de l'ordre de $\Gamma' \tau_c \ll 1$. Les moyennes à deux temps $\langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle$ peuvent donc, avec une très bonne approximation, être considérées comme obéissant à l'équation :

$$t \geq t' \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle = - \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Delta \right) \langle \hat{b}^+(t) \hat{b}(t') \rangle \quad (80)$$

tout à fait analogue à l'adjoint de l'équation (41)

$$t \geq t' \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{b}^+ (t) \rangle = - \left(\frac{\Gamma}{2} - i\Delta \right) \langle \hat{b}^+ (t) \rangle \quad (81)$$

donnant l'évolution des moyennes à un temps.

Le résultat précédent constitue le théorème de régression quantique qui permet de calculer l'évolution des moyennes à deux temps à partir d'équations ayant la même structure que celles donnant l'évolution des moyennes à un temps, c'est-à-dire encore à partir de l'équation pilote.

Finalement, nous avons pu, sur ce modèle simple d'un oscillateur couplé à un réservoir d'oscillateurs, étendre à un système quantique la plupart des résultats obtenus à partir de l'équation de Langevin du mouvement Brownien. Nous verrons dans le complément A_V qu'il est possible aussi de généraliser ces résultats au cas d'un atome à deux niveaux couplé à un réservoir d'oscillateurs (en l'occurrence, les modes du rayonnement), et d'obtenir ainsi les équations de Bloch-Langevin. Une telle généralisation est non triviale car un atome à deux niveaux est non linéaire, ce qui fait apparaître dans les équations d'évolution couplées des termes non linéaires rendant le maniement de ces équations plus délicat que dans le cas linéaire étudié ici.

RÉFÉRENCES

Sur la théorie classique du mouvement Brownien, voir Van Kampen.

Sur les équations de Langevin quantiques d'un système couplé à un réservoir, voir Lax ou encore M. Lax, Phys. Rev. **145**, 110 (1966) et les références qui y sont citées.

Sur le problème spécifique de l'oscillateur harmonique, voir I.R. Senitzky, Phys. Rev. **119**, 670 (1960) ; Louisell, chapitre 7 ; Sargent, Scully and Lamb, chapitre 19.

CHAPITRE V

Equations de Bloch optiques

Après avoir étudié, dans le chapitre précédent, l'évolution d'un système atomique placé dans le vide de rayonnement ou en présence d'un rayonnement à large bande spectrale, nous abordons maintenant l'étude de situations où l'atome interagit avec un rayonnement incident *monochromatique*, dont la fréquence est très proche d'une fréquence propre atomique. Notre objectif est de comprendre, d'une part l'évolution temporelle du système atomique, d'autre part les caractéristiques essentielles de la lumière que l'atome réemet en présence du rayonnement qui l'excite (« lumière de fluorescence »).

Le traitement que nous allons présenter n'est pas perturbatif vis-à-vis du champ incident. En effet, nous désirons pouvoir étudier le cas où l'intensité lumineuse incidente est suffisamment élevée pour « saturer » la transition atomique (fréquence de Rabi associée grande devant la largeur naturelle des niveaux). Une telle situation est courante dans les expériences utilisant des sources laser. Il n'est plus possible alors de se contenter de calculer la réponse linéaire de l'atome ou d'étudier des processus de diffusion à un seul photon incident, comme nous l'avons fait dans la partie C du chapitre II ou dans le complément *B_{III}*.

Le problème physique étudié dans ce chapitre ne peut pas non plus être abordé simplement à partir des méthodes non perturbatives du chapitre III, qui sont basées sur le calcul de la résolvante $G(z)$ de l'hamiltonien dans un sous-espace \mathcal{E}_0 d'états privilégiés. En effet, lorsque le rayonnement incident contient plusieurs photons et qu'il excite une transition atomique partant de l'état fondamental a , un très grand nombre d'états du système global atome + champ doivent être pris en compte (voir § C-4-f du chapitre III). Ces états correspondent aux nombreux « cycles de fluorescence » que l'atome peut effectuer à

partir de l'état fondamental a (en passant de a à b par absorption d'un photon incident $k\epsilon$, puis en retournant de b à a par émission spontanée d'un photon dans un autre mode $k'\epsilon'$). Le sous-espace \mathcal{E}_0 d'états privilégiés a alors une dimension trop élevée pour que l'on puisse effectuer des calculs simples sur la restriction de $G(z)$ dans ce sous-espace.

Plutôt que d'étudier l'évolution du système global atome + champ, on peut alors songer plus modestement à établir une équation d'évolution pour le système atomique seul. Il est clair cependant que les méthodes du chapitre IV ne sont pas directement applicables au problème étudié ici, car le rayonnement ne peut plus être considéré comme un réservoir. Le temps de corrélation du rayonnement incident monochromatique est en effet infiniment long. Il est donc impossible d'établir des équations analogues aux équations (E.15) et (E.21) du chapitre IV permettant de décrire les phénomènes physiques en termes de taux de transition entre niveaux, associés aux processus d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée.

Par ailleurs, s'il était possible de ne tenir compte que du couplage de l'atome avec le rayonnement incident, considéré comme un champ extérieur monochromatique, on pourrait bien sûr écrire l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution du vecteur d'état atomique sous l'effet de cette perturbation sinusoïdale. Mais il est indispensable ici de tenir compte également du couplage de l'atome avec les modes vides du champ. Ce sont en effet ces couplages et les processus de relaxation correspondants qui permettent à l'atome d'atteindre un régime stationnaire, résultant de la compétition entre l'excitation par l'onde incidente et l'amortissement par émission spontanée. De plus, la lumière que l'atome réemet et que nous désirons analyser n'est autre que la lumière apparaissant dans ces modes initialement vides.

Les équations de Bloch optiques, que nous étudions dans ce chapitre, expriment précisément que la vitesse de variation de la matrice densité atomique est une somme de deux termes décrivant respectivement la contribution du couplage avec l'onde incidente et celle du couplage avec les modes vides. Nous commençons dans la partie A par établir ces équations de Bloch optiques pour un atome à deux niveaux et par préciser les diverses écritures possibles de ces équations. Nous analysons ensuite, dans la partie B, le contenu physique des équations de Bloch optiques en insistant sur ce qui les différencie d'autres types d'équations d'évolution. Nous passons enfin en revue un certain nombre de problèmes physiques que ces équations permettent d'aborder. La partie C est consacrée à une étude de l'évolution temporelle des divers degrés de liberté internes et externes de l'atome. La partie D précise enfin diverses propriétés (intensité totale, répartition spectrale, ...) de la lumière de fluorescence émise par l'atome. Une telle analyse repose

sur l'étude des fonctions de corrélation du dipôle atomique et utilise le théorème de régression quantique qui est établi dans le complément A_V à partir des équations de Heisenberg couplées de l'atome et du champ.

A - ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES POUR UN ATOME A DEUX NIVEAUX

Pour simplifier au maximum les calculs, nous considérons un seul atome, immobile à l'origine 0 des coordonnées, avec seulement deux niveaux discrets non dégénérés, l'état fondamental a et le premier état excité b , situé à une distance $\hbar\omega_0$ au-dessus de a et de largeur naturelle Γ .

1. Description du rayonnement incident

Le rayonnement incident sera traité comme un champ extérieur, et donc décrit par une fonction classique donnée du temps. Les particules interagissent, d'une part avec ce champ extérieur, d'autre part avec le champ de rayonnement quantique que nous supposons initialement dans l'état vide $|0\rangle$. L'hamiltonien du système atome + champ s'écrit donc (à l'approximation des grandes longueurs d'onde et dans le point de vue dipolaire électrique)

$$H = H_A + H_R - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) + \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})] \quad (\text{A.1})$$

où H_A est l'hamiltonien de l'atome, H_R celui du champ, \mathbf{d} le moment dipolaire électrique de l'atome, \mathbf{E}_e le champ extérieur associé au rayonnement incident, $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})$ le champ de rayonnement quantique.

Nous supposerons de plus le champ incident monochromatique, de fréquence ω_L et d'amplitude \mathbf{E}_0 .

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) = \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t \quad (\text{A.2})$$

Remarques

(i) La description du rayonnement incident par un champ extérieur n'est pas une approximation si le champ quantique est initialement dans un état cohérent. Ce résultat est démontré dans l'exercice 17.

(ii) Nous négligeons également ici toute modification du rayonnement incident due à son interaction avec l'atome. Plus précisément, nous considérons un seul atome soumis à un rayonnement incident « macroscopique » tel que celui issu d'une source laser. Nous pouvons alors valablement négliger l'absorption ou l'amplification d'un tel rayonnement par l'atome. Notre traitement exclut donc des situations où un ensemble d'atomes interagit avec un champ dont ils sont eux-mêmes la source. Une telle situation se rencontre par exemple pour des atomes dans une cavité, ou pour des milieux optiquement épais. Dans ce cas, il faut résoudre des équations d'évolution couplées pour les atomes et le champ appelées parfois « équations de Bloch-Maxwell » (*).

(*) Voir par exemple Sargent, Scully and Lamb, chapitre VIII ; Allen and Eberly, chapitre IV.

2. Approximation des vitesses de variation indépendantes

Si le champ extérieur (A.2) était nul, nous pourrions écrire l'équation d'évolution de la matrice densité atomique σ . En effet, lorsque l'état initial du champ total est le vide, le rayonnement peut être traité comme un réservoir. L'équation d'évolution de σ est alors l'équation pilote décrivant l'effet de l'émission spontanée sur un atome à deux niveaux (voir équations (E.5) et (E.6) du chapitre IV).

Par ailleurs, si nous pouvions négliger l'effet du couplage avec le champ quantique $E_{\perp}(0)$ dans (A.1), l'évolution de σ serait simplement donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\dot{\sigma} = [H_A - \mathbf{d}\cdot\mathbf{E}_0 \cos \omega_L t, \sigma] \quad (\text{A.3})$$

L'approximation des vitesses de variation indépendantes consiste à ajouter indépendamment les vitesses de variation de σ associées aux deux couplages précédents, $-\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}_0 \cos \omega_L t$ et $-\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}_{\perp}(0)$, et calculées comme si chaque couplage agissait *tout seul*. En explicitant l'équation (A.3) dans la base $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ et en ajoutant les termes d'amortissement des équations (E.5) et (E.6) du chapitre IV décrivant l'effet de l'émission spontanée, nous obtenons

$$\dot{\sigma}_{bb} = i\Omega_1 \cos \omega_L t (\sigma_{ba} - \sigma_{ab}) - \Gamma \sigma_{bb} \quad (\text{A.4.a})$$

$$\dot{\sigma}_{aa} = -i\Omega_1 \cos \omega_L t (\sigma_{ba} - \sigma_{ab}) + \Gamma \sigma_{bb} \quad (\text{A.4.b})$$

$$\dot{\sigma}_{ab} = i\omega_0 \sigma_{ab} - i\Omega_1 \cos \omega_L t (\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) - \frac{\Gamma}{2} \sigma_{ab} \quad (\text{A.4.c})$$

$$\dot{\sigma}_{ba} = -i\omega_0 \sigma_{ba} + i\Omega_1 \cos \omega_L t (\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) - \frac{\Gamma}{2} \sigma_{ba} \quad (\text{A.4.d})$$

Nous avons supposé que les déplacements radiatifs de a et b étaient réintégrés dans la fréquence atomique ω_0 , et nous avons posé

$$\hbar\Omega_1 = -\mathbf{d}_{ab}\cdot\mathbf{E}_0 \quad (\text{A.5})$$

où

$$\mathbf{d}_{ab} = \langle a | \mathbf{d} | b \rangle = \langle b | \mathbf{d} | a \rangle \quad (\text{A.6})$$

est l'élément de matrice de \mathbf{d} , supposé réel. La fréquence Ω_1 est appelée « *fréquence de Rabi* ». Elle caractérise l'intensité du couplage entre l'atome et l'onde incidente. Chacune des deux vitesses que nous avons ajoutées en (A.4) conserve la normalisation de σ , c'est-à-dire satisfait à $\dot{\sigma}_{aa} + \dot{\sigma}_{bb} = 0$.

En utilisant pour décrire l'effet de l'émission spontanée les mêmes termes qu'en l'absence de rayonnement, nous négligeons les modifications de l'émission spontanée liées à la présence du rayonnement incident. Une telle approximation est valable si l'effet du couplage avec

ce rayonnement peut être négligé pendant le temps de corrélation τ_c des fluctuations du vide, responsables de l'émission spontanée. On peut montrer (nous reviendrons plus loin sur ce point dans le complément A_V et dans le chapitre VI) que tel est bien le cas si la fréquence de Rabi Ω_1 est très petite devant la fréquence ω_0 de la transition $a \leftrightarrow b$

$$\Omega_1 \ll \omega_0 \quad (\text{A.7})$$

Une telle condition est d'ailleurs sous-jacente à l'approximation consistant à ne tenir compte que de deux niveaux atomiques. Si elle n'était pas satisfaite, il faudrait en plus tenir compte du couplage entre l'onde incidente et toutes les autres transitions atomiques. Pour pouvoir nous limiter à deux niveaux, nous devons d'ailleurs, en plus de (A.7), supposer que

$$|\omega_L - \omega_0| \ll \omega_0 \quad (\text{A.8})$$

condition exprimant que le rayonnement incident, de fréquence ω_L , est quasirésonnant avec la transition $a \leftrightarrow b$.

Remarque

Le seul processus de relaxation considéré ici est l'émission spontanée dont le temps de corrélation est plus court que la période optique ω_0^{-1} . Il serait possible d'inclure dans les équations (A.4) des termes décrivant l'effet d'autres processus de relaxation, comme par exemple des collisions (voir par exemple l'exercice 18). L'approximation consistant à ajouter indépendamment les vitesses de variation n'est alors valable que si

$$\Omega_1 \ll \tau_c^{-1} \quad (\text{A.7}')$$

$$|\omega_L - \omega_0| \ll \tau_c^{-1} \quad (\text{A.8}')$$

où τ_c est le temps de corrélation de ces processus de relaxation supplémentaires. Dans le cas de la relaxation collisionnelle, τ_c est de l'ordre du temps de collision et les conditions (A.7') et (A.8') définissent la « limite d'impact » (voir complément B_{VI}).

3. Approximation du champ tournant

a) ÉLIMINATION DES TERMES ANTIRÉSONNANTS

Le dipôle \mathbf{d} , qui est purement non diagonal dans la base $\{ |a\rangle, |b\rangle \}$, peut être écrit, d'après (A.6)

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_{ab}(|b\rangle\langle a| + |a\rangle\langle b|) = \mathbf{d}_+ + \mathbf{d}_- \quad (\text{A.9})$$

avec

$$\mathbf{d}_\pm = \mathbf{d}_{ab} \mathcal{S}_\pm \quad (\text{A.10.a})$$

$$\mathcal{S}_+ = |b\rangle\langle a| \quad (\text{A.10.b})$$

$$\mathcal{S}_- = |a\rangle\langle b| \quad (\text{A.10.c})$$

Les opérateurs \mathcal{S}_+ et \mathcal{S}_- font respectivement « monter » et « descendre » l'atome de a à b et de b à a . Réexprimons l'hamiltonien d'interaction, $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t$, en fonction de \mathcal{S}_+ , \mathcal{S}_- et des exponentielles $\exp(-i\omega_L t)$ et $\exp(+i\omega_L t)$ qui proviennent de $\cos \omega_L t$ et qui sont respectivement associées à l'absorption et à l'émission d'un photon. Il vient, compte tenu de (A.5)

$$-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t = \frac{1}{2} \hbar \Omega_1 [\mathcal{S}_+ e^{-i\omega_L t} + \mathcal{S}_- e^{i\omega_L t} + \mathcal{S}_- e^{-i\omega_L t} + \mathcal{S}_+ e^{i\omega_L t}] \quad (\text{A.11})$$

Les deux premiers termes du crochet décrivent des processus où l'atome monte de a à b en absorbant un photon ou descend de b à a en émettant un photon. Ces processus sont résonnantes au voisinage de $\omega = \omega_0$ et sont beaucoup plus importants que les processus non résonnantes associés aux deux derniers termes de (A.11) (l'atome descend de b à a en absorbant un photon ou monte de a à b en émettant un photon). Nous négligerons (*) donc dans la suite de ce chapitre les deux derniers termes de (A.11). L'approximation correspondante est appelée approximation du « champ tournant » pour des raisons qui apparaîtront plus loin (§ A.4).

b) FORME INDÉPENDANTE DU TEMPS DES ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES

Si l'on ne conserve que les deux premiers termes de (A.11), les équations (A.4) sont modifiées : $\sigma_{ba} \cos \omega_L t$ et $\sigma_{ab} \cos \omega_L t$ sont respectivement remplacés par $\sigma_{ba} [\exp(i\omega_L t)]/2$ et $\sigma_{ab} [\exp(-i\omega_L t)]/2$ au second membre de (A.4.a) et (A.4.b) ; $\cos \omega_L t$ est remplacé par $(\exp i\omega_L t)/2$ dans (A.4.c) et par $(\exp -i\omega_L t)/2$ dans (A.4.d). Il est possible alors de faire disparaître toute dépendance temporelle dans les coefficients des équations au moyen du changement de variables

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{ba} &= \sigma_{ba} e^{i\omega_L t} \\ \hat{\sigma}_{ab} &= \sigma_{ab} e^{-i\omega_L t} \\ \hat{\sigma}_{aa} &= \sigma_{aa} \quad \hat{\sigma}_{bb} = \sigma_{bb} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

qui conduit aux équations suivantes

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}_{bb} = i \frac{\Omega_1}{2} (\hat{\sigma}_{ba} - \hat{\sigma}_{ab}) - \Gamma \hat{\sigma}_{bb} \quad (\text{A.13.a})$$

(*) Nous perdons ainsi certains effets physiques, comme le déplacement de Bloch-Siegert de la résonance $\omega_0 = \omega$, sur lesquels nous reviendrons dans le complément A VI.

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}_{aa} = -i \frac{\Omega_1}{2} (\hat{\sigma}_{ba} - \hat{\sigma}_{ab}) + \Gamma \hat{\sigma}_{bb} \quad (\text{A.13.b})$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}_{ab} = -i \delta_L \hat{\sigma}_{ab} - i \frac{\Omega_1}{2} (\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}) - \frac{\Gamma}{2} \hat{\sigma}_{ab} \quad (\text{A.13.c})$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}_{ba} = i \delta_L \hat{\sigma}_{ba} + i \frac{\Omega_1}{2} (\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}) - \frac{\Gamma}{2} \hat{\sigma}_{ba} \quad (\text{A.13.d})$$

où

$$\delta_L = \omega_L - \omega_0 \quad (\text{A.14})$$

est le désaccord entre la fréquence ω_L de l'onde incidente et la fréquence atomique ω_0 . Notons que nous avons toujours $d(\hat{\sigma}_{aa} + \hat{\sigma}_{bb})/dt = 0$.

c) AUTRES FORMES DES ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES

Il sera utile pour la suite de réécrire les équations (A.13) en termes de valeurs moyennes d'opérateurs. Introduisons pour cela les trois opérateurs

$$S_+ = e^{-i\omega_L t} \mathcal{S}_+ = e^{-i\omega_L t} |b\rangle \langle a| \quad (\text{A.15.a})$$

$$S_- = e^{i\omega_L t} \mathcal{S}_- = e^{i\omega_L t} |a\rangle \langle b| \quad (\text{A.15.b})$$

$$S_Z = \frac{1}{2} (|b\rangle \langle b| - |a\rangle \langle a|) \quad (\text{A.15.c})$$

dont les valeurs moyennes valent

$$\langle S_+ \rangle = \text{Tr}(\sigma \mathcal{S}_+ e^{-i\omega_L t}) = \sigma_{ab} e^{-i\omega_L t} = \hat{\sigma}_{ab} \quad (\text{A.16.a})$$

$$\langle S_- \rangle = \text{Tr}(\sigma \mathcal{S}_- e^{i\omega_L t}) = \sigma_{ba} e^{i\omega_L t} = \hat{\sigma}_{ba} \quad (\text{A.16.b})$$

$$\langle S_Z \rangle = \text{Tr}\left[\sigma \frac{1}{2} (|b\rangle \langle b| - |a\rangle \langle a|)\right] = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}) \quad (\text{A.16.c})$$

Jointes à la condition de normalisation

$$\sigma_{aa} + \sigma_{bb} = \hat{\sigma}_{aa} + \hat{\sigma}_{bb} = 1 \quad (\text{A.17})$$

ces équations permettent de réécrire (A.13) sous la forme

$$\langle \dot{S}_+ \rangle = - \left(i \delta_L + \frac{\Gamma}{2} \right) \langle S_+ \rangle - i \Omega_1 \langle S_Z \rangle \quad (\text{A.18.a})$$

$$\langle \dot{S}_- \rangle = - \left(-i \delta_L + \frac{\Gamma}{2} \right) \langle S_- \rangle + i \Omega_1 \langle S_Z \rangle \quad (\text{A.18.b})$$

$$\langle \dot{S}_Z \rangle = \frac{i \Omega_1}{2} [\langle S_- \rangle - \langle S_+ \rangle] - \Gamma \left(\langle S_Z \rangle + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.18.c})$$

Introduisons enfin d'autres variables

$$u = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{ab} + \hat{\sigma}_{ba}) \quad (\text{A.19.a})$$

$$v = \frac{1}{2i} (\hat{\sigma}_{ab} - \hat{\sigma}_{ba}) \quad (\text{A.19.b})$$

$$w = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}) \quad (\text{A.19.c})$$

qui sont très souvent utilisées dans ce type de problèmes (u, v, w sont les trois composantes du « vecteur de Bloch »). Réexprimées en fonction de u, v, w , les équations (A.13) deviennent

$$\dot{u} = \delta_L v - \frac{\Gamma}{2} u \quad (\text{A.20.a})$$

$$\dot{v} = -\delta_L u - \Omega_1 w - \frac{\Gamma}{2} v \quad (\text{A.20.b})$$

$$\dot{w} = \Omega_1 v - \Gamma w \quad (\text{A.20.c})$$

w représente la moitié de la différence entre les populations des deux niveaux b et a . Pour interpréter u et v , calculons la valeur moyenne de \mathbf{d}

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{d} \rangle &= \text{Tr}(\sigma \mathbf{d}) = \mathbf{d}_{ab}(\sigma_{ab} + \sigma_{ba}) \\ &= \mathbf{d}_{ab}(\hat{\sigma}_{ab} e^{i\omega_L t} + \hat{\sigma}_{ba} e^{-i\omega_L t}) \\ &= 2 \mathbf{d}_{ab} (u \cos \omega_L t - v \sin \omega_L t) \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

La comparaison de (A.21) et (A.2) montre que u et v sont respectivement proportionnels aux composantes de $\langle \mathbf{d} \rangle$ en phase et en quadrature avance avec le champ incident (puisque $-\sin \omega_L t = \cos(\omega_L t + \pi/2)$).

4. Représentation géométrique en termes de spin $\frac{1}{2}$ fictif

Tout système à deux niveaux est formellement équivalent à un spin $\frac{1}{2}$ fictif. Assurons ainsi aux états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ les états $|-\rangle$ et $|+\rangle$ d'un tel spin

$$|a\rangle \leftrightarrow |-\rangle \quad |b\rangle \leftrightarrow |+\rangle \quad (\text{A.22})$$

et introduisons les opérateurs de spin (sans dimensions) \mathcal{S}_x , \mathcal{S}_y , \mathcal{S}_z , représentés dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ par les matrices

$$(\mathcal{S}_x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\mathcal{S}_y) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\mathcal{S}_z) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

qui ne sont autres, à un facteur $\frac{1}{2}$ près, que les matrices de Pauli.

Chaque opérateur du système à deux niveaux est représenté dans la base $\{|b\rangle, |a\rangle\}$ par une matrice 2×2 qui peut toujours être développée sur les trois matrices (A.23) et la matrice unité ($\mathbb{1}$). Ainsi

$$(H_A) = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0}{2} (\mathbb{1}) + \hbar\omega_0 (\mathcal{S}_z) \quad (\text{A.24.a})$$

$$(-\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\xi}_0 \cos \omega_L t) = \hbar\Omega_1 \cos \omega_L t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2\hbar\Omega_1 \cos \omega_L t (\mathcal{S}_x) \quad (\text{A.24.b})$$

Les hamiltoniens H_A et $-\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\xi}_0 \cos \omega_L t$ peuvent donc être considérés comme des hamiltoniens décrivant l'interaction du spin fictif avec des champs magnétiques \mathbf{B}_0 et $2\mathbf{B}_1 \cos \omega_L t$, respectivement parallèles à $0z$ et $0x$, et d'amplitudes telles que les fréquences de précession de Larmor du spin autour de ces deux champs soient ω_0 et $2\Omega_1 \cos \omega_L t$ (figure 1.a).

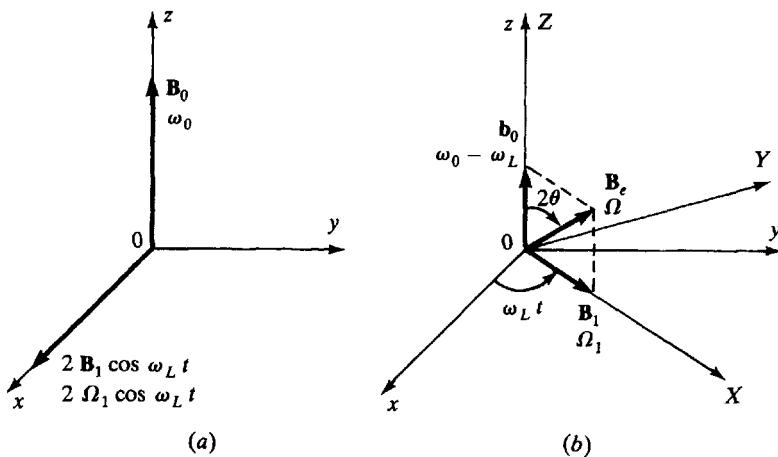


Figure 1. Champs magnétiques agissant sur le spin fictif
 a - Dans le référentiel du laboratoire $0xyz$
 b - Dans le référentiel $0XYZ$ tournant autour de $0z$ à la fréquence ω_L (la composante du champ tournant en sens inverse étant négligée).

Le champ $2\mathbf{B}_1 \cos \omega_L t$ parallèle à $0x$ peut être décomposé en deux champs, de même amplitude B_1 , tournant dans le plan $x0y$ à la fréquence ω_L dans le sens direct et dans le sens inverse. Si $\omega_L = \omega_0$, la composante tournant dans le sens direct accompagne le spin dans sa précession de Larmor autour de \mathbf{B}_0 et peut donc agir efficacement sur lui, alors que l'autre composante tourne beaucoup trop vite par rapport au spin (à la fréquence $-2\omega_L$) pour avoir un effet

appréciable. L'approximation du champ tournant consiste précisément à ne conserver que la composante tournant dans le même sens que le spin, d'où le nom donné à cette approximation.

Plaçons-nous alors dans le référentiel $0XYZ$ tournant autour de $0z$ à la fréquence ω_L . Dans ce référentiel, la composante tournante que nous conservons du champ $2B_1 \cos \omega_L t$ devient un *champ fixe* B_1 parallèle à $0X$ et le champ le long de $0Z$ est réduit de B_0 à b_0 puisque la précession de Larmor du spin autour de $0Z$ est réduite de ω_0 à $\omega_0 - \omega_L$ (figure 1.b). Dans le référentiel tournant, le spin « voit » donc la résultante B_e de b_0 et B_1 , appelée *champ efficace*, autour de laquelle il précessse à la fréquence

$$\Omega = \sqrt{\Omega_1^2 + \delta_L^2} \quad (\text{A.25})$$

A résonance ($\delta_L = \omega_L - \omega_0 = 0$), b_0 est nul et le spin précessse autour de B_1 à la fréquence de Rabi Ω_1 . Nous retrouvons bien l'oscillation de Rabi du système entre les deux niveaux a et b .

Montrons d'ailleurs que les variables u, v, w introduites en (A.19) sont en fait les valeurs moyennes des composantes du spin dans le référentiel tournant. Notons pour cela que la correspondance (A.22) et les formules (A.23) entraînent les relations habituelles $\mathcal{S}_\pm = \mathcal{S}_x \pm i\mathcal{S}_y$. Ainsi, la définition (A.19.a) de u et les relations (A.16) permettent d'écrire u sous la forme

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \{ \sigma [(\mathcal{S}_x + i\mathcal{S}_y) e^{-i\omega_L t} + (\mathcal{S}_x - i\mathcal{S}_y) e^{i\omega_L t}] \} \\ &= \langle \mathcal{S}_x \rangle \cos \omega_L t + \langle \mathcal{S}_y \rangle \sin \omega_L t \\ &= \langle \mathcal{S} \rangle \cdot \mathbf{e}_X \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

où \mathbf{e}_X est le vecteur unitaire de l'axe $0X$ du référentiel tournant. Des relations semblables peuvent être établies pour v et w , de sorte que

$$u = \langle \mathcal{S}_X \rangle \quad v = \langle \mathcal{S}_Y \rangle \quad w = \langle \mathcal{S}_Z \rangle \quad (\text{A.27})$$

Le fait que v soit en quadrature avance par rapport à u est alors évident géométriquement. Avec ces nouvelles notations, les équations (A.20) deviennent

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_X \rangle = \delta_L \langle \mathcal{S}_Y \rangle - \frac{\Gamma}{2} \langle \mathcal{S}_X \rangle \quad (\text{A.28.a})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_Y \rangle = -\delta_L \langle \mathcal{S}_X \rangle - \Omega_1 \langle \mathcal{S}_Z \rangle - \frac{\Gamma}{2} \langle \mathcal{S}_Y \rangle \quad (\text{A.28.b})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_Z \rangle = \Omega_1 \langle \mathcal{S}_Y \rangle - \Gamma \langle \mathcal{S}_Z \rangle - \frac{\Gamma}{2} \quad (\text{A.28.c})$$

et ressemblent tout à fait aux équations de Bloch de la résonance magnétique (avec des temps de relaxation T_1 et T_2 qui valent ici, pour l'émission spontanée, $1/\Gamma$ et $2/\Gamma$).

B - DISCUSSION PHYSIQUE - DIFFÉRENCES AVEC D'AUTRES ÉQUATIONS D'ÉVOLUTION

1. Différences avec des équations de relaxation. Couplages entre populations et cohérences

Contrairement aux équations de relaxation étudiées dans le chapitre IV, les équations de Bloch (A.13) ne se séparent pas en deux groupes distincts où n'apparaissent que les populations $\hat{\sigma}_{aa}$ et $\hat{\sigma}_{bb}$ des deux niveaux, ou que les « cohérences » $\hat{\sigma}_{ab}$ et $\hat{\sigma}_{ba}$ (éléments non diagonaux de la matrice densité). Il n'est donc pas possible de les interpréter directement en termes de taux de transition entre les niveaux a et b .

Le fait que les termes en Ω_1 des équations (A.13) couplent entre elles populations et cohérences est lié au caractère cohérent du champ extérieur. La différence de phase entre l'oscillation du moment dipolaire électrique moyen $\langle \mathbf{d} \rangle$ et l'onde incidente $\mathbf{E}_0 \cos \omega_L t$ est en effet cruciale pour déterminer si l'atome va absorber de l'énergie ($\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}$ augmente) ou en perdre ($\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}$ diminue). La vitesse de variation de $\hat{\sigma}_{bb} - \hat{\sigma}_{aa}$ dépend donc nécessairement de $\langle \mathbf{d} \rangle$, c'est-à-dire, d'après (A.21), de $\hat{\sigma}_{ba}$ et $\hat{\sigma}_{ab}$ (plus précisément de la composante en quadrature $v = (\hat{\sigma}_{ab} - \hat{\sigma}_{ba})/2i$ qui intervient dans le travail effectué par le champ sur le dipôle).

Remarque

Il existe des situations où les équations de Bloch peuvent être transformées en équations de relaxation pour les seules populations. Si les cohérences évoluent beaucoup plus vite que les populations (par suite d'un processus de relaxation supplémentaire qui les amortit beaucoup plus efficacement que les différences de population), elles peuvent « suivre adiabatiquement » l'évolution des populations, c'est-à-dire atteindre à chaque instant le régime stationnaire correspondant à la valeur des populations supposées « figées » à cet instant. Il est alors possible de réexprimer à chaque instant les cohérences en fonction des populations au même instant et d'obtenir ainsi des équations d'évolution pour les seules populations. Un exemple de problème physique où les cohérences peuvent être éliminées adiabatiquement est analysé dans l'exercice 18 qui étudie le cas d'un atome à deux niveaux subissant des collisions qui introduisent un élargissement collisionnel bien supérieur à Γ .

2. Différences avec des équations d'évolution hamiltoniennes

Nous avons vu dans le chapitre III que l'instabilité de l'état excité b , due à l'émission spontanée, pouvait souvent être décrite par

l'adjonction d'une partie imaginaire, $-i\hbar\Gamma/2$, à l'énergie $E_b = \hbar\omega_0$ de cet état (nous prenons $E_a = 0$). On peut donc se demander s'il ne serait pas possible d'écrire les équations (A.4) sous forme hamiltonienne, en remplaçant dans l'équation (A.3) l'hamiltonien atomique H_A par « l'hamiltonien non hermitique »

$$(H'_A) = \hbar \begin{pmatrix} \omega_0 - i \frac{\Gamma}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

et en remplaçant de plus le commutateur $H_A \sigma - \sigma H_A$ par $H'_A \sigma - \sigma H'^+_A$, de manière à préserver l'hermiticité de $d\sigma/dt$, et donc de σ . Il se trouve effectivement qu'une telle procédure redonne bien les « bonnes » équations d'évolution (A.4.a), (A.4.c) et (A.4.d) pour $\dot{\sigma}_{bb}$, $\dot{\sigma}_{ab}$, $\dot{\sigma}_{ba}$. Par contre, l'équation d'évolution obtenue de cette manière pour $\dot{\sigma}_{aa}$ ne contient pas le terme de transfert de b vers a , $\Gamma \sigma_{bb}$, figurant au second membre de l'équation correcte (A.4.b).

Il n'est donc pas possible de trouver un hamiltonien atomique, même généralisé de manière à inclure des énergies complexes, qui permette d'écrire les équations de Bloch optiques comme une équation de Schrödinger. Ceci montre en particulier qu'il est indispensable de décrire le système atomique par un opérateur densité, et que toute description de l'effet de l'émission spontanée en termes de vitesse de variation d'un vecteur d'état atomique est impossible. Ceci est bien sûr lié au fait que les équations de Bloch optiques décrivent l'évolution d'un sous-système (l'atome) qui fait partie d'un ensemble plus vaste (l'atome + le rayonnement quantique).

3. Différences avec des équations de Heisenberg-Langevin

Ecrites sous la forme (A.18), les équations de Bloch optiques apparaissent comme des équations d'évolution de valeurs moyennes d'opérateurs atomiques S_+ , S_- , S_z . On peut se demander s'il serait correct d'écrire les mêmes équations pour les opérateurs eux-mêmes au lieu des valeurs moyennes.

Un contre-exemple simple permet de montrer qu'une telle démarche serait incorrecte. Réécrites dans le cas particulier $\Omega_1 = 0$, et sans valeur moyenne, les équations (A.18.a) et (A.18.b) entraîneraient en effet que S_+ et S_- décroissent tous deux exponentiellement vers zéro, ce qui est incompatible avec l'identité opératorielle $S_+ S_- + S_- S_+ = |b\rangle \langle b| + |a\rangle \langle a| = \mathbb{1}$, qui découle de (A.15) et qui doit être vérifiée quel que soit t .

En fait, les équations de Heisenberg pour S_+ , S_- , S_z peuvent être

mises sous une forme voisine de (A.18), mais où apparaissent en plus au second membre des « *forces de Langevin* » F_+ , F_- , F_z , qui représentent en quelque sorte la partie fluctuante de la « force » exercée sur l'atome par le rayonnement quantique, l'effet cumulatif de cette force étant représenté par les termes de « friction » en Γ (voir complément A_V). De manière plus précise, si les équations de Bloch (A.18) pour les *valeurs moyennes* $\langle S_q \rangle$ (avec $q = +, -, z$) s'écrivent sous forme condensée

$$\langle \dot{S}_q \rangle = \sum_{q' = +, -, z} \mathcal{B}_{qq'} \langle S_{q'} \rangle + \lambda_q, \quad (\text{B.2})$$

les équations de Heisenberg-Langevin pour les *opérateurs* S_q

$$\dot{S}_q = \sum_{q' = +, -, z} \mathcal{B}_{qq'} S_{q'} + \lambda_q + F_q \quad (\text{B.3})$$

en diffèrent par le terme F_q , qui est un opérateur agissant à la fois sur les degrés de liberté de l'atome et du rayonnement. La valeur moyenne de F_q est nulle, de sorte que les équations de Heisenberg-Langevin (B.3) redonnent bien en valeur moyenne les équations de Bloch (B.2). La présence de F_q est cependant indispensable dans l'équation opératoire (B.3) pour assurer que les diverses relations de commutation entre S_+ , S_- , S_z soient préservées au cours du temps. Notons enfin que F_q fluctue très vite, dans la mesure où les moyennes à deux temps $\langle F_q(t)F_{q'}(t+\tau) \rangle$ décroissent très vite avec τ , sur une échelle de temps τ_c (temps de corrélation des fluctuations du vide) beaucoup plus courte que le temps de relaxation Γ^{-1} associé à l'émission spontanée ou la période de Rabi Ω_1^{-1} .

C - PREMIÈRE APPLICATION - ÉVOLUTION DES VALEURS MOYENNES ATOMIQUES

L'étude des solutions des équations de Bloch optiques permet tout d'abord d'analyser l'évolution temporelle des quantités u , v , w qui sont des *valeurs moyennes d'observables atomiques « internes »*, comme le dipôle moyen ou la différence de population entre les états b et a . C'est ce que nous faisons dans le paragraphe 1 de cette partie. Il est possible également d'exprimer en fonction de u et v la force moyenne exercée par le rayonnement incident sur le dipôle atomique oscillant. Les équations de Bloch optiques permettent donc aussi d'analyser les « *forces radiatives moyennes* exercées par un faisceau lumineux sur un atome. Ces forces, qui agissent sur les degrés de liberté « externes » ou de translation de l'atome, sont étudiées dans le paragraphe 2.

1. Degrés de liberté internes

a) ALLURE DU RÉGIME TRANSITOIRE

Les équations de Bloch optiques (A.20) ou (B.2) sont des équations différentielles linéaires à coefficients constants. Les solutions de ces équations sont donc des superpositions d'exponentielles $\exp(-r_\lambda t)$. Nous ne donnerons pas ici l'expression générale des racines caractéristiques $-r_\lambda$ associées à la matrice de Bloch (\mathcal{B}_{qq}). Nous nous contenterons plutôt d'étudier quelques cas limites.

A la limite $\Omega_1 \rightarrow 0$ et pour $\omega_L = \omega_0$ ($\delta_L = 0$), il apparaît sur (A.18) que deux racines r_λ sont égales à $\Gamma/2$, la troisième à Γ . Aux intensités très faibles, et à résonance, le régime transitoire est donc purement amorti (sans oscillations).

Par contre, pour $\Omega_1 \gg \Gamma$ et δ_L toujours nul, le régime transitoire doit refléter l'oscillation de Rabi à la fréquence Ω_1 . On peut le voir très simplement sur la représentation du problème en termes de spin fictif $\frac{1}{2}$ (voir figure 1.b). Dans le référentiel tournant $0XYZ$, le champ \mathbf{b}_0 est nul et le spin précessé à la fréquence Ω_1 autour de \mathbf{B}_1 qui est aligné sur $0X$. La composante du spin dans le plan $Y0Z$ tourne donc très vite à la fréquence Ω_1 en passant successivement sur les axes $0Y$ et $0Z$ où les taux d'amortissement sont respectivement égaux à $\Gamma/2$ et Γ . On s'attend donc à ce que le taux d'amortissement moyen (au cours d'une période $2\pi/\Omega_1$) soit la demi-somme de $\Gamma/2$ et Γ , c'est-à-dire $3\Gamma/4$. Deux des exponentielles du régime transitoire doivent donc être $\exp(\pm i\Omega_1 t) \exp(-3\Gamma t/4)$. La troisième correspond au mouvement du spin le long de $0X$, qui est purement amorti avec un taux

$\Gamma/2$. Un calcul de r_1 , r_2 , r_3 confirme effectivement que

$$\text{si } \Omega_1 \gg \Gamma \text{ et } \delta_L = 0$$

$$r_1 = i\Omega_1 + \frac{3\Gamma}{4} \quad r_2 = -i\Omega_1 + \frac{3\Gamma}{4} \quad r_3 = \frac{\Gamma}{2} \quad (\text{C.1})$$

Considérons enfin le cas $|\delta_L| \gg |\Omega_1|, \Gamma$. Le champ efficace \mathbf{B}_e de la figure 1.b est alors pratiquement aligné sur OZ . Le mouvement du spin dans le plan XOY est dans ce cas une précession à la fréquence δ_L , amortie avec un taux $\Gamma/2$, alors que le mouvement sur OZ est purement amorti avec un taux Γ . On trouve effectivement que

$$\text{si } |\delta_L| \gg \Omega_1, \Gamma$$

$$r_1 = i\delta_L + \frac{\Gamma}{2} \quad r_2 = -i\delta_L + \frac{\Gamma}{2} \quad r_3 = \Gamma \quad (\text{C.2})$$

b) ÉTUDE DU RÉGIME STATIONNAIRE

La solution stationnaire des équations de Bloch (A.20) vaut

$$u_{st} = \frac{\Omega_1}{2} \frac{\delta_L}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (\text{C.3.a})$$

$$v_{st} = \frac{\Omega_1}{2} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (\text{C.3.b})$$

$$w_{st} + \frac{1}{2} = \sigma_{bb}^{st} = \frac{\Omega_1^2}{4} \frac{1}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (\text{C.3.c})$$

Nous avons donné la valeur de $w_{st} + \frac{1}{2}$ plutôt que celle de w_{st} , car elle représente la population stationnaire de l'état supérieur b (voir (A.17) et (A.19.c)).

Il apparaît sur les équations (C.3) que la composante en quadrature du dipole (v_{st}) et la population de l'état supérieur varient avec le désaccord $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ comme une courbe d'absorption, centrée en $\delta_L = 0$ et de demi-largeur $[\Gamma^2/4 + (\Omega_1^2/2)]^{1/2}$, alors que la composante en phase (u_{st}) varie comme une courbe de dispersion. Quand, δ_L étant fixé, Ω_1 augmente, u_{st} et v_{st} commencent par croître linéairement en Ω_1 , puis passent par un maximum et tendent vers zéro pour Ω_1 très grand. Aux très fortes intensités, le dipôle moyen est donc nul. Quant à la population σ_{bb}^{st} , elle commence par croître quadratiquement en Ω_1 , puis tend vers une valeur limite égale à $\frac{1}{2}$ quand Ω_1 tend vers l'infini. Une excitation intense égalise donc les populations

des deux niveaux. On dit que la transition est alors « saturée ». Il est d'ailleurs courant d'exprimer la solution (C.3) en fonction du « *paramètre de saturation* »

$$s = \frac{\Omega_1^2/2}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (\text{C.4})$$

qui représente le degré de saturation de la transition. Il vient alors

$$u_{st} = \frac{\delta_L}{\Omega_1} \frac{s}{1+s} \quad v_{st} = \frac{\Gamma}{2\Omega_1} \frac{s}{1+s} \quad \sigma_{bb}^{st} = \frac{1}{2} \frac{s}{1+s} \quad (\text{C.5})$$

Notons enfin que la présence de Ω_1^2 au dénominateur des équations (C.3) entraîne que ces expressions ne sont pas perturbatives vis-à-vis du champ incident puisque le développement en série des fractions fait apparaître des puissances arbitrairement élevées de Ω_1 .

c) BILAN D'ÉNERGIE. NOMBRE MOYEN DE PHOTONS INCIDENTS ABSORBÉS PAR UNITÉ DE TEMPS

Entre t et $t+dt$, l'électron atomique se déplace de $d\mathbf{r}$ et le champ incident $\mathbf{E}_0 \cos \omega_L t$ effectue sur lui un travail

$$dW = q \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{C.6})$$

La puissance moyenne absorbée par l'atome vaut donc, compte tenu du fait que $q \langle \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{d} \rangle$:

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t \cdot \langle \mathbf{d} \rangle \quad (\text{C.7})$$

Reportons alors dans (C.7) l'expression (A.21) donnant $\langle \mathbf{d} \rangle$ en fonction de u et v , et moyennons (C.7) sur une période optique. Il vient :

$$\begin{aligned} \overline{\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle} &= -2 \mathbf{d}_{ab} \cdot \mathbf{E}_0 \omega_L [\overline{\cos^2 \omega_L t} v + \overline{\sin \omega_L t \cos \omega_L t} u] \\ &= \hbar \Omega_1 \omega_L v \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

où nous avons utilisé la définition (A.5) de Ω_1 . Il apparaît ainsi clairement que la puissance moyenne absorbée n'est reliée qu'à la composante en quadrature v du dipôle moyen de l'atome. Il suffit enfin de diviser (C.8) par l'énergie $\hbar \omega_L$ de chaque photon incident pour obtenir le nombre moyen de photons absorbés par unité de temps par l'atome.

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle = \Omega_1 v \quad (\text{C.9})$$

L'équation (C.9) permet alors d'interpréter très simplement la troisième équation de Bloch (A.20.c). En remplaçant w par $(\sigma_{bb} - \sigma_{aa})/2 = \sigma_{bb} - (1/2)$ dans cette équation, on obtient en effet :

$$\dot{\sigma}_{bb} = \left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle - \Gamma \sigma_{bb} \quad (\text{C.10})$$

Toute disparition d'un photon incident correspond à un passage de l'atome de a à b . C'est ce qu'exprime le premier terme de (C.10). Toute émission spontanée d'un photon correspond à un départ de l'atome de l'état b . C'est ce qu'exprime le second terme de (C.10). En régime stationnaire, $\dot{\sigma}_{bb}$ est nul. Le nombre de photons absorbés par unité de temps est alors égal au nombre de photons émis spontanément par unité de temps

$$\left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle_{st} = \Gamma \sigma_{bb}^s \quad (\text{C.11})$$

2. Degrés de liberté externes. Forces radiatives moyennes

Jusqu'ici, nous avons considéré un atome infiniment lourd, immobile à l'origine des coordonnées. Si l'on veut tenir compte de ses degrés de liberté de translation, il faut remplacer l'hamiltonien (A.1) par

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + H_A + H_R - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{E}_e(\mathbf{R}, t) + \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{R})] \quad (\text{C.12})$$

où \mathbf{P} et \mathbf{R} sont l'impulsion et la position du centre de masse de l'atome, M la masse totale. Le premier terme de (C.12) représente l'énergie cinétique de translation de l'atome. Le champ extérieur et le champ de rayonnement sont maintenant évalués au centre de masse \mathbf{R} de l'atome.

a) ÉQUATION DU MOUVEMENT DU CENTRE DU PAQUET D'ONDES ATOMIQUE

Les équations de Heisenberg pour \mathbf{R} et \mathbf{P} s'écrivent :

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}} = \frac{\mathbf{P}}{M} \quad (\text{C.13.a})$$

$$\dot{\mathbf{P}} = M \ddot{\mathbf{R}} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}} = \sum_{j=x,y,z} d_j \nabla_{\mathbf{R}} [E_{ej}(\mathbf{R}, t) + E_{\perp j}(\mathbf{R})] \quad (\text{C.13.b})$$

L'équation (C.13.b) prise en valeur moyenne dans la fonction d'onde atomique donne (équation d'Ehrenfest) :

$$M \langle \ddot{\mathbf{R}} \rangle = \sum_j \langle d_j \nabla_{\mathbf{R}} [E_{ej}(\mathbf{R}, t) + E_{\perp j}(\mathbf{R})] \rangle \quad (\text{C.14})$$

Soit $\mathbf{r}_G = \langle \mathbf{R} \rangle$ le centre du paquet d'ondes atomique. Le membre de gauche de (C.14) n'est autre que $M\ddot{\mathbf{r}}_G$. Pour évaluer le membre de droite, nous allons introduire deux approximations.

(i) *Limite des petits paquets d'ondes atomiques*

Compte tenu de la valeur élevée de M , la longueur d'onde de de Broglie de l'atome, $\lambda_{DB} = h/Mv$, est en général beaucoup plus petite que la longueur d'onde lumineuse λ , qui caractérise l'échelle des variations spatiales du rayonnement incident. Il est donc possible de construire des paquets d'onde atomiques dont les dimensions sont très petites devant la longueur d'onde lumineuse. Pour de tels paquets d'ondes, il est tout à fait légitime de remplacer au second membre de (C.14) l'opérateur \mathbf{R} par sa valeur moyenne $\langle \mathbf{R} \rangle = \mathbf{r}_G$. On peut montrer que le dernier terme de (C.14), qui représente la contribution du gradient du champ de rayonnement quantique en \mathbf{r}_G , est nul (*). L'équation (C.14) s'écrit alors :

$$M\ddot{\mathbf{r}}_G = \sum_{j=x,y,z} \langle d_j \rangle \nabla E_{ej}(\mathbf{r}_G, t) \quad (\text{C.15})$$

Le second membre peut être interprété comme la force qui régit le mouvement du centre du paquet d'ondes atomique. Cette force s'exprime en fonction du rayonnement incident évalué en ce même point \mathbf{r}_G .

(ii) *Existence de deux échelles de temps distinctes pour l'évolution des degrés de liberté internes et externes*

Comme nous l'avons vu plus haut, les degrés de liberté internes de l'atome évoluent appréciablement sur des échelles de temps de l'ordre de $T_{int} = \Gamma^{-1}$ (ou Ω_1^{-1} si $\Omega_1 \gg \Gamma$). Nous ne considérons ici que des atomes de vitesse v très lente, dont le déplacement $v T_{int} = v \Gamma^{-1}$ est supposé très petit devant l'échelle de variation de l'onde lumineuse (de l'ordre de λ). Par ailleurs, nous verrons plus loin que, sous l'effet des forces radiatives, la vitesse elle-même évolue sur des échelles de temps de l'ordre de $T_{ext} = \hbar/E_{rec}$ où $E_{rec} = \hbar^2 k^2 / 2M$ est l'énergie de recul de l'atome lors de l'absorption d'un photon $k\epsilon$. Pour la plupart des transitions permises, $\hbar \Gamma \gg E_{rec}$, ce qui entraîne que $T_{int} \ll T_{ext}$ (par exemple, pour les raies jaunes du sodium, $\hbar \Gamma \approx 400 E_{rec}$).

La grande différence entre T_{int} et T_{ext} entraîne que, si \mathbf{r}_G est initialement immobile en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, le dipôle moyen $\langle \mathbf{d} \rangle$ a le temps d'atteindre le régime stationnaire calculé dans le paragraphe C-1-b avant que \mathbf{r}_G n'ait eu le temps de se déplacer appréciablement sous l'effet de la force radiative moyenne écrite au second membre de (C.15). Dans la suite de cette partie, nous nous intéresserons à la force

(*) Voir la remarque à la fin du paragraphe 2 du complément A_v .

radiative moyenne s'exerçant sur un atome initialement immobile en $\mathbf{0}$. Nous pourrons donc, pour calculer une telle force, remplacer dans (C.15) $\langle d_j \rangle$ par sa valeur stationnaire calculée plus haut.

Remarques

- (i) On peut bien sûr s'intéresser aussi à la force radiative moyenne agissant sur un atome de vitesse \mathbf{v} . Là encore, la condition $T_{\text{int}} \ll T_{\text{ext}}$ permet de négliger la variation de \mathbf{v} pendant le temps nécessaire pour que $\langle d_j \rangle$ atteigne un régime forcé. Les équations de Bloch utilisées pour le calcul de $\langle d_j \rangle$ doivent alors tenir compte du fait que le rayonnement incident « vu » par un atome en mouvement n'est pas le même que pour un atome immobile. L'intérêt des forces radiatives dépendant de la vitesse de l'atome est qu'elles permettent dans certains cas d'amortir la vitesse de l'atome et constituent donc un moyen efficace de refroidissement.
- (ii) Dans toute cette partie, nous nous intéressons uniquement à la force radiative moyenne s'exerçant sur l'atome. Les fluctuations de cette force autour de sa valeur moyenne sont responsables d'une diffusion de l'impulsion atomique et d'un échauffement des degrés de liberté de translation. Ces phénomènes physiques peuvent être analysés à partir d'équations de Bloch-Langevin analogues à celles introduites dans le complément A_v (*).

b) LES DEUX TYPES DE FORCES POUR UN ATOME INITIALEMENT IMMOBILE

Au voisinage de l'origine $\mathbf{0}$ où se trouve l'atome, le champ incident s'écrit

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{r},t) = \mathbf{e} \mathcal{E}_0(\mathbf{r}) \cos[\omega_L t + \phi(\mathbf{r})] \quad (\text{C.16})$$

Il a une amplitude $\mathcal{E}_0(\mathbf{r})$ et une phase $\phi(\mathbf{r})$ qui varient dans l'espace. Par contre, nous supposons que le vecteur polarisation \mathbf{e} ne dépend pas de \mathbf{r} . L'origine des temps peut toujours être choisie de façon que la phase $\phi(\mathbf{r})$ soit nulle en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

$$\phi(\mathbf{0}) = 0 \quad (\text{C.17})$$

Nous retrouvons ainsi le champ (A.2) introduit plus haut.

Compte tenu de (C.16) et (C.17), le gradient de champ apparaissant dans (C.15) s'écrit :

$$\nabla E_{ej} = e_j [\cos \omega_L t \nabla \mathcal{E}_0 - \sin \omega_L t \mathcal{E}_0 \nabla \phi] \quad (\text{C.18})$$

où ∇E_{ej} , $\nabla \mathcal{E}_0$, $\nabla \phi$, \mathcal{E}_0 sont évalués en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Par ailleurs, nous avons vu dans le paragraphe précédent qu'il est possible de prendre, pour le

(*) Voir par exemple J. P. Gordon and A. Ashkin, Phys. Rev. A21, 1606 (1980).

dipôle moyen $\langle \mathbf{d} \rangle$, l'expression (A.21) obtenue plus haut où u et v sont remplacés par leur valeurs stationnaires.

$$\langle d_j \rangle = 2(\mathbf{d}_{ab})_j [u_{st} \cos \omega_L t - v_{st} \sin \omega_L t] \quad (\text{C.19})$$

Reportons alors (C.18) et (C.19) dans (C.15) et prenons la moyenne sur une période optique. Nous obtenons pour la force radiative moyenne \mathcal{F} s'exerçant sur l'atome l'expression

$$\mathcal{F} = \sum_j \overline{\langle d_j \rangle \nabla E_{ej}} = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{ab}) [u_{st} \nabla \mathcal{E}_0 + v_{st} \mathcal{E}_0 \nabla \phi] \quad (\text{C.20})$$

qui fait apparaître deux types de force : une force proportionnelle au gradient d'amplitude et à la composante en phase du dipôle, force que nous appellerons « réactive »

$$\mathcal{F}_{\text{react}} = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{ab}) u_{st} \nabla \mathcal{E}_0 \quad (\text{C.21})$$

et une force proportionnelle au gradient de phase et à la composante en quadrature du dipôle, force que nous appellerons « dissipative »

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{ab}) v_{st} \mathcal{E}_0 \nabla \phi \quad (\text{C.22})$$

Il sera commode pour la suite de réexprimer ces deux forces en fonction de la fréquence de Rabi Ω_1 qui s'écrit, d'après (A.5) et (C.16) :

$$\Omega_1 = - \mathbf{d}_{ab} \cdot \mathbf{e} \mathcal{E}_0 / \hbar \quad (\text{C.23})$$

On obtient alors :

$$\mathcal{F}_{\text{react}} = - \hbar \Omega_1 u_{st} \alpha \quad (\text{C.24.a})$$

avec

$$\alpha = \frac{\nabla \Omega_1}{\Omega_1} \quad (\text{C.24.b})$$

et

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = - \hbar \Omega_1 v_{st} \beta \quad (\text{C.25.a})$$

avec

$$\beta = \nabla \phi \quad (\text{C.25.b})$$

c) FORCE DISSIPATIVE - PRESSION DE RADIATION

L'exemple le plus simple d'onde lumineuse possédant un gradient de phase est l'onde plane de vecteur d'onde \mathbf{k}_L

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e} \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{C.26})$$

qui a une amplitude constante et une phase $\phi(\mathbf{r}) = -\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}$ de sorte que

$$\mathbf{B} = \nabla \phi = -\mathbf{k}_L \quad (\text{C.27})$$

Pour une telle onde, la force réactive est nulle (puisque $\nabla \mathcal{E}_0 = \mathbf{0}$) et la force dissipative s'écrit, compte tenu de (C.25) et (C.27) :

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = \Omega_1 v_{st} \hbar \mathbf{k}_L \quad (\text{C.28})$$

L'égalité (C.9) permet alors de transformer (C.28) en

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = \left\langle \frac{dN}{dt} \right\rangle_{st} \hbar \mathbf{k}_L \quad (\text{C.29})$$

où $\langle dN/dt \rangle_{st}$ est le nombre moyen de photons incidents disparaissant par unité de temps en régime stationnaire. L'interprétation physique de l'équation (C.29) est très claire. Chaque photon incident transporte une impulsion $\hbar \mathbf{k}_L$ qui est gagnée par l'atome lors de l'absorption d'un tel photon. Si l'atome retourne à l'état fondamental par émission stimulée d'un photon, il perd cette impulsion au profit du faisceau incident qui récupère ainsi l'impulsion correspondante. Par contre, si l'atome retourne à l'état fondamental par émission spontanée, la perte d'impulsion est nulle en moyenne, car l'émission spontanée peut avoir lieu avec des probabilités égales dans deux directions opposées. De plus, un cycle de fluorescence, c'est-à-dire un cycle absorption-émission spontanée, fait disparaître définitivement un photon du faisceau incident. On comprend ainsi pourquoi l'impulsion moyenne gagnée par unité de temps par l'atome, c'est-à-dire encore la force moyenne qu'il subit, est $\hbar \mathbf{k}_L$ fois le nombre moyen de photons incidents qui disparaissent par unité de temps. La force (C.29) est souvent appelée pour cette raison « force de pression de radiation » ou « force de diffusion résonnante ».

L'équation (C.11) permet également d'écrire (C.29) sous la forme

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = \Gamma \sigma_{bb}^{st} \hbar \mathbf{k}_L \quad (\text{C.30})$$

et montre que la force dissipative est aussi égale à $\hbar \mathbf{k}_L$ fois le nombre de photons émis spontanément par unité de temps. Le remplacement de σ_{bb}^{st} par sa valeur (C.3.c) donne

$$\mathcal{F}_{\text{dissip}} = \hbar \mathbf{k}_L \frac{\Gamma}{2} \frac{\Omega_1^2/2}{(\omega_L - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (\text{C.31})$$

La force dissipative varie avec le désaccord $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ comme une lorentzienne centrée en $\omega_L = \omega_0$, de largeur totale à mi-hauteur $[\Gamma^2 + 2\Omega_1^2]^{1/2}$. A faible intensité, la force est proportionnelle à Ω_1^2 , donc

à l'intensité. A haute intensité, elle tend vers une limite

$$\mathcal{F}_{\text{sat}} = \hbar k_L \frac{\Gamma}{2} \quad (\text{C.32})$$

indépendante de l'intensité.

Remarques

(i) Donnons un ordre de grandeur de \mathcal{F}_{sat} , ou plutôt de l'accélération

$$\gamma = \frac{\mathcal{F}_{\text{sat}}}{M} \quad (\text{C.33})$$

qu'une telle force est susceptible de communiquer. Pour l'atome de sodium excité sur les raies jaunes, on trouve $|\gamma| = 10^6 \text{ m/s}^2$, soit environ 10^5 fois l'accélération de la pesanteur.

(ii) Les résultats précédents permettent d'évaluer un ordre de grandeur du temps T_{ext} caractérisant les variations temporelles des degrés de liberté externes. Considérons un atome initialement immobile, éclairé par une onde lumineuse plane résonnante. Sous l'effet de la pression de radiation correspondante, sa vitesse va croître à partir de 0 en γt , où γ est donné par le module de (C.33). Le temps T_{ext} est le temps au bout duquel la vitesse a atteint une valeur v_m telle que l'atome « sort de résonance » par effet Doppler vis-à-vis de l'onde incidente et ne subit donc plus l'effet de cette onde. Le temps T_{ext} et la vitesse v_m sont donnés par les équations

$$\gamma T_{\text{ext}} = \frac{\hbar k_L}{M} \Gamma T_{\text{ext}} = v_m \quad (\text{C.34.a})$$

$$k_L v_m \approx \Gamma \quad (\text{C.34.b})$$

L'élimination de v_m entre ces deux équations donne

$$T_{\text{ext}} \sim \frac{M}{\hbar k_L^2} \sim \frac{\hbar}{E_{\text{rec}}} \quad (\text{C.35})$$

ce qui justifie la valeur \hbar/E_{rec} prise plus haut comme ordre de grandeur de T_{ext} .

d) FORCE RÉACTIVE - FORCE DIPOLAIRE

Une onde plane n'a pas de gradient d'amplitude. Pour avoir $\nabla \mathcal{E}_0$, et par suite $\mathcal{F}_{\text{react}}$, non nuls, il faut donc nécessairement superposer plusieurs ondes planes de vecteurs d'onde différents.

Considérons pour fixer les idées le cas simple d'une onde stationnaire résultant de la superposition de deux ondes planes de vecteurs d'onde opposés $+k_L$ et $-k_L$. Si k_L est parallèle à $0z$ et e parallèle à $0x$, l'onde incidente (C.16) s'écrit

$$\mathbf{E}_e(\mathbf{r}, t) = e_x \mathcal{E}_0 \cos k_L z \cos \omega_L t \quad (\text{C.36})$$

et a une amplitude variant sinusoïdalement dans l'espace avec une période $\lambda = 2\pi/k_L$. Par contre, la phase de l'onde est constante.

La force réactive, qui dépend d'après (C.21) de la composante u du dipôle en phase avec le champ incident, ne fait pas intervenir d'échange d'énergie entre l'atome et le champ incident. Ces échanges ne dépendent en effet, d'après (C.8), que de la composante en quadrature v . L'absence d'échange global d'énergie entre l'atome et le champ n'implique pas cependant l'absence de *redistribution* d'énergie entre les différentes ondes planes constituant l'onde incidente. Par exemple, un atome dans une onde stationnaire peut très bien absorber un photon dans l'onde $+k_L$, puis émettre de manière stimulée un photon dans *l'autre* onde $-k_L$. A l'issue de ce cycle, absorption dans une onde puis émission stimulée dans une autre onde, l'énergie globale du champ n'a pas changé. Mais un photon est passé de l'onde $+k_L$ à l'onde $-k_L$, ce qui fait varier l'impulsion du champ de $-2\hbar k_L$, et donc celle de l'atome de $+2\hbar k_L$.

Pour préciser le raisonnement précédent, représentons dans le plan complexe (voir Fig. 2) les champs E_1 et E_2 de deux ondes planes k_L et $-k_L$ en un point où nous supposons par exemple que ces champs sont en quadrature (pour plus de généralité, nous prenons E_1 et E_2 d'amplitudes différentes). Considérons la réponse réactive u du dipôle au champ total E . Cette réponse u est en phase (ou en opposition de phase suivant le signe du désaccord $\omega_L - \omega_0$) avec E .

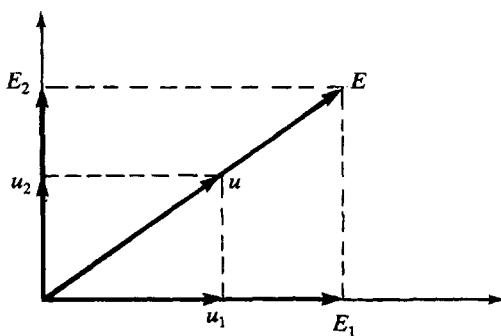


Figure 2. Représentation dans le plan complexe d'un champ E résultant de la superposition de deux champs E_1 et E_2 en quadrature. u, u_1, u_2 sont les dipôles en phase respectivement avec E, E_1, E_2 .

Soient u_1 et u_2 les projections de u sur E_1 et E_2 . La composante u_1 en phase avec E_1 n'absorbe pas d'énergie sur E_1 . Il en est de même pour u_2 et E_2 . Par contre, u_2 est en quadrature avancé sur E_1 , alors que u_1 est en quadrature retard sur E_2 . Si l'onde E_1 perd de l'énergie en

interagissant avec u_2 , l'onde E_2 en gagne en interagissant avec u_1 . De plus, comme $|E_1||u_2| = |E_2||u_1|$, l'énergie perdue par une onde est gagnée par l'autre. Le schéma précédent permet ainsi de comprendre, d'une part l'existence d'une redistribution d'énergie entre les deux ondes, d'autre part le caractère *cohérent* de cette redistribution puisque son sens ($1 \rightarrow 2$ ou $2 \rightarrow 1$) dépend des phases relatives des deux ondes au point où se trouve l'atome. Notons enfin que, suivant que u est en phase ou en opposition de phase avec E , le sens de la distribution est différent. Le même schéma permet donc de prévoir également que le sens de la redistribution, et donc le signe de la force réactive, dépendent du signe du désaccord $\omega_L - \omega_0$.

Pour obtenir l'expression générale de la force réactive, reportons l'expression (C.3.a) de u_{st} dans (C.24.a). Il vient :

$$\mathcal{F}_{\text{react}} = -\frac{\hbar(\omega_L - \omega_0)}{4} \frac{\nabla(\Omega_1^2)}{(\omega_L - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (\text{C.37})$$

On retrouve bien que $\mathcal{F}_{\text{react}}$, qui varie avec le désaccord $\omega_L - \omega_0$ comme une courbe de dispersion, change de signe avec $\omega_L - \omega_0$. Pour $\omega_L < \omega_0$ (désaccord vers le rouge), la force attire l'atome vers les régions d'intensité élevée. Pour $\omega_L > \omega_0$ (désaccord vers le bleu), elle le repousse hors de ces régions.

Pour chaque valeur de l'intensité, donc de Ω_1^2 , la valeur du désaccord $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ qui maximise $|\mathcal{F}_{\text{react}}|$ est différente. On trouve que cette valeur de $|\delta_L|$ est de l'ordre de $|\Omega_1|$, de sorte que la valeur maximale de $|\mathcal{F}_{\text{react}}|$ est de l'ordre de

$$|\mathcal{F}_{\text{react}}| \sim \frac{\hbar |\nabla \Omega_1^2|}{\Omega_1} \sim \hbar |\nabla \Omega_1| \quad (\text{C.38})$$

A la différence de la force dissipative, la force réactive croît indéfiniment quand l'intensité de l'onde croît. Comme $|\nabla \Omega_1|$ est au maximum de l'ordre de $k_L \Omega_1$, où $k_L = 2\pi/\lambda$, on voit que la valeur maximale de $|\mathcal{F}_{\text{react}}|$ est de l'ordre de $\hbar k_L \Omega_1$, ce qui correspond à des échanges d'impulsion de $\hbar k_L$ se produisant avec un taux Ω_1 , comme il se doit pour une force faisant intervenir des cycles absorption-émission induite. Un tel résultat est à comparer avec la valeur maximale (C.32) de la force dissipative qui est de l'ordre de $\hbar k_L$ fois le taux d'émission spontanée Γ .

Notons enfin que la force réactive (C.37) dérive d'un potentiel

$$\mathcal{F}_{\text{react}} = -\nabla U \quad (\text{C.39})$$

où

$$U = \frac{\hbar(\omega_L - \omega_0)}{2} \operatorname{Log} \left[1 + \frac{\Omega_1^2/2}{(\omega_L - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \right] \quad (\text{C.40})$$

Pour un désaccord vers le rouge, les régions d'intensité maximale, comme la zone focale d'un faisceau laser, apparaissent donc comme des trous de potentiel pour l'atome. De tels trous peuvent être utilisés pour piéger des atomes neutres.

La force réactive $\mathcal{F}_{\text{react}}$ est encore appelée force dipolaire. Nous verrons dans le chapitre VI qu'on peut en donner une autre interprétation physique, en termes de niveaux d'énergie de l'atome habillé par les photons incidents. Cette image nous permettra également de comprendre le mécanisme des fluctuations de cette force autour de sa valeur moyenne, fluctuations qui limitent considérablement la stabilité des pièges optiques que cette force permet de réaliser.

D - PROPRIÉTÉS DE LA LUMIÈRE ÉMISE PAR L'ATOME

Dans cette dernière partie, nous montrons que les équations de Bloch optiques, qui sont des équations d'évolution atomiques, permettent aussi d'analyser les propriétés de la lumière de fluorescence émise par l'atome. Nous utilisons pour cela le fait que le champ rayonné par l'atome au niveau du photodétecteur observant la lumière émise est proportionnel au dipôle atomique. Les signaux de photodétection qui, d'après les résultats du complément A_{II} , sont proportionnels à des fonctions de corrélation du champ arrivant sur le détecteur, peuvent donc être réexprimés en termes de moyennes à un ou deux temps du dipôle émetteur (§ 1). Un exemple important de signal lumineux proportionnel à une moyenne à un temps est l'intensité totale émise. Nous montrons sur cet exemple simple comment il est possible de distinguer, dans la lumière émise, la contribution du dipôle moyen et celle des fluctuations du dipôle autour de sa valeur moyenne (§ 2). La plupart des autres signaux sont proportionnels à des moyennes à deux temps. Le théorème de régression quantique, établi dans le complément A_V , permet d'étudier l'évolution des moyennes à deux temps du dipôle atomique à partir des équations de Bloch optiques. Nous l'appliquons ici à l'étude de la répartition spectrale de la lumière émise (§ 3).

1. Signaux de photodétection et moyennes à un ou deux temps du dipôle émetteur

a) LIEN ENTRE LE CHAMP RAYONNÉ ET LE DIPÔLE ÉMETTEUR

Considérons le champ rayonné à l'emplacement \mathbf{r}_D du détecteur et à l'instant t par l'atome placé en $\mathbf{0}$. Ce champ est proportionnel au dipôle \mathbf{d} de l'atome (*) à l'instant $t - (r_D/c)$:

$$E(\mathbf{r}_D, t) = \eta \mathbf{d} \left(t - \frac{r_D}{c} \right) \quad (\text{D.1})$$

où η est un coefficient de proportionnalité. Pour simplifier les notations, nous avons ignoré le caractère vectoriel de E et d . L'équation (D.1) est valable entre opérateurs dans le point de vue de Heisenberg. Nous nous intéressons aux mouvements des opérateurs dont les fréquences sont voisines de $\pm \omega_L$ (ou $\pm \omega_0$). Notons $E^{(+)}$ et $E^{(-)}$ les

(*) En toute rigueur, E est proportionnel à \ddot{d} (voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 6 du complément E_{IV}). Mais nous nous intéressons ici aux mouvements de d dont la fréquence est proche de ω_L de sorte que $\ddot{d} \approx -\omega_L^2 d$.

composantes de fréquence positive et négative de l'opérateur $E(\mathbf{r}_D, t)$. De même, d'après (A.9), (A.10) et (A.15), le dipôle d peut être décomposé en deux termes de fréquences opposées, $S_- \exp(-i\omega_L t)$ et $S_+ \exp(+i\omega_L t)$. A partir de (D.1) il est donc possible d'écrire :

$$E^{(\pm)}(\mathbf{r}_D, t) = \eta e^{\mp i\omega_L \left(t - \frac{r_D}{c}\right)} S_{\mp} \left(t - \frac{r_D}{c}\right) \quad (\text{D.2})$$

Remarque

En toute rigueur, l'expression (D.1) ne représente pas le champ *total* au niveau du détecteur même si, comme nous le supposons ici, ce détecteur est situé hors du faisceau laser incident, de sorte que $E_e(\mathbf{r}_D, t) = 0$. L'intégration des équations du mouvement des opérateurs a et a^+ du champ en présence des sources fait en effet apparaître deux contributions (voir par exemple les équations (23) à (26) du complément A_V) : l'une qui dépend du dipôle émetteur et qui donne naissance au champ rayonné ou « *champ des sources* », l'autre qui est indépendante du dipôle et qui représente le « *champ quantique du vide* ». On peut cependant montrer que ce dernier ne contribue pas aux signaux de photodétection (voir remarques (ii) et (iii) à la fin du paragraphe b suivant). Nous l'ignorons donc ici.

b) EXPRESSION DES SIGNAUX DE PHOTODÉTECTION

Dans le complément A_H , nous avons introduit deux fonctions de corrélation du champ E arrivant sur le détecteur

$$C_1(t, \tau) = \langle E^{(-)}(\mathbf{r}_D, t + \tau) E^{(+)}(\mathbf{r}_D, t) \rangle \quad (\text{D.3})$$

$$C_2(t, \tau) = \langle E^{(-)}(\mathbf{r}_D, t) E^{(-)}(\mathbf{r}_D, t + \tau) E^{(+)}(\mathbf{r}_D, t + \tau) E^{(+)}(\mathbf{r}_D, t) \rangle \quad (\text{D.4})$$

à partir desquelles il est possible d'exprimer un certain nombre de signaux de photodétection. Ainsi,

$$C_1(t, 0) = \langle E^{(-)}(\mathbf{r}_D, t) E^{(+)}(\mathbf{r}_D, t) \rangle = \langle I(t) \rangle, \quad (\text{D.5})$$

qui est une moyenne à un temps, donne *l'intensité totale* moyenne à l'instant t , telle qu'elle est mesurée par un photodétecteur à bande large. La transformée de Fourier de $C_1(t, \tau)$ par rapport à τ

$$\mathcal{I}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega\tau} \langle E^{(-)}(\mathbf{r}_D, t + \tau) E^{(+)}(\mathbf{r}_D, t) \rangle \quad (\text{D.6})$$

donne la *densité spectrale* du rayonnement, telle qu'elle est mesurée par un photodétecteur à bande étroite. Enfin, $C_2(t, \tau)$ représente un signal de *corrélation de photons*, proportionnel à la densité de probabilité de

déetecter un photoélectron à l'instant t et un autre à l'instant $t + \tau$.

Dans les deux paragraphes qui suivent, nous étudions successivement l'intensité totale (D.5) et la répartition spectrale (D.6) de la lumière émise, la discussion du signal de corrélation de photons (D.4) étant reportée au paragraphe E-3 du chapitre VI. L'utilisation de (D.2) dans (D.5) et (D.6) donne alors :

$$\langle I(t) \rangle = \eta^2 \langle S_+(t - (r_D/c)) S_-(t - (r_D/c)) \rangle \quad (\text{D.7})$$

$$\mathcal{I}(\omega) = \frac{\eta^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_L - \omega)\tau} \times \\ \times \langle S_+(t + \tau - (r_D/c)) S_-(t - (r_D/c)) \rangle \quad (\text{D.8})$$

Remarques

(i) Comme nous tenons compte ici des sources du champ E , ce dernier n'est pas libre et les deux opérateurs $E^{(+)}$ de (D.4) ne commutent pas entre eux, de même que les deux $E^{(-)}$. Rappelons alors que l'interprétation de (D.4) comme un signal de corrélation de photons n'est valable que si τ est positif (voir remarque à la fin du complément A_{II}).

(ii) Revenons sur la contribution du champ du vide aux signaux de photodétection. L'équation (D.2) doit être remplacée par :

$$E^{(\pm)}(\mathbf{r}_D, t) = E_0^{(\pm)}(\mathbf{r}_D, t) + \\ + \eta e^{\mp i\omega_L(t - (r_D/c))} S_{\mp}(t - (r_D/c)) \quad (\text{D.9})$$

où E_0 est le champ quantique du vide. De nombreux termes dépendant de $E_0^{(\pm)}$ apparaissent alors dans les expressions de C_1 et C_2 lors du report de (D.9) dans (D.3) et (D.4). Il est possible cependant de montrer que tous ces nouveaux termes sont nuls. Considérons par exemple la fonction C_1 . Comme l'état du champ quantique est le vide,

$$E_0^{(+)}(\mathbf{r}_D, t) |0\rangle = 0 \quad (\text{D.10.a})$$

$$\langle 0 | E_0^{(-)}(\mathbf{r}_D, t) = 0 \quad (\text{D.10.b})$$

Or les $E_0^{(\pm)}$ apparaissent dans l'ordre normal dans (D.3). L'utilisation de (D.10) montre alors que tous les termes nouveaux apparaissant dans C_1 sont nuls.

(iii) La démonstration précédente ne s'applique pas à C_2 . Il reste en effet des termes de la forme

$$\langle 0 | S_+(t - (r_D/c)) S_+(t + \tau - (r_D/c)) \times \\ \times E_0^{(+)}(\mathbf{r}_D, t + \tau) S_-(t - (r_D/c)) |0\rangle \quad (\text{D.11})$$

pour lesquels la présence de S_- à droite de $E_0^{(+)}$ empêche de faire agir $E_0^{(+)}$ sur $|0\rangle$. Le fait que τ soit positif dans C_2 (voir remarque (i)) permet cependant de montrer que $E_0^{(+)}(\mathbf{r}_D, t + \tau)$ commute avec $S_-(t - (r_D/c))$ et

peut donc agir sur $|0\rangle$ pour donner un résultat nul. Nous nous contenterons ici d'un argument physique simple pour faire comprendre ce résultat^(*). Le champ quantique $E_0^{(+)}(\mathbf{r}_D, t + \tau)$ ne commute pas avec le champ quantique $E_0^{(-)}(\mathbf{r}', t')$ si \mathbf{r}', t' est sur le cône de lumière de $\mathbf{r}_D, t + \tau$. Un tel cône de lumière coupe l'axe des temps de l'atome émetteur situé en $\mathbf{0}$ au temps $t + \tau - (r_D/c)$ qui est dans le futur du temps $t - (r_D/c)$ apparaissant dans l'opérateur S_- de (D.11), puisque τ est positif. Or, le dipôle $S_-(t - (r_D/c))$ ne dépend que du champ quantique $E_0^{(\pm)}$ en son emplacement qui a agi sur lui dans le passé de $t - (r_D/c)$. Il commute donc avec $E_0^{(+)}(\mathbf{r}_D, t + \tau)$ pour $\tau > 0$.

2. Intensité totale de la lumière émise

a) PROPORTIONNALITÉ À LA POPULATION DU NIVEAU ATOMIQUE EXCITÉ

Comme les deux opérateurs S_+ et S_- apparaissent dans l'expression (D.7) de $\langle I(t) \rangle$ sont pris au même instant, on peut utiliser la relation $S_+ S_- = |b\rangle \langle b|$ qui donne

$$\langle I(t) \rangle = \eta^2 \sigma_{bb} (t - (r_D/c)) \quad (\text{D.12})$$

Un tel résultat exprime physiquement que l'énergie lumineuse arrivant sur le détecteur à l'instant t est proportionnelle à la population σ_{bb} de l'état atomique excité à l'instant $t - (r_D/c)$. Il est à la base des méthodes de détection optique qui consistent à suivre sur le signal donné par le photodétecteur à bande large l'évolution des populations atomiques σ_{bb} et $\sigma_{aa} = 1 - \sigma_{bb}$, aussi bien en régime transitoire que stationnaire. Dans ce dernier cas, l'étude des variations de σ_{bb} avec $\omega_L - \omega_0$ permet de détecter le phénomène de résonance optique.

b) DIFFUSION COHÉRENTE ET DIFFUSION INCOHÉRENTE

Réécrivons les opérateurs S_{\pm} de (D.7) sous la forme

$$S_{\pm}(t - (r_D/c)) = \langle S_{\pm}(t - (r_D/c)) \rangle + \delta S_{\pm}(t - (r_D/c)) \quad (\text{D.13})$$

où $\langle S_{\pm} \rangle$ est la valeur moyenne de S_{\pm} et où

$$\delta S_{\pm}(t - (r_D/c)) = S_{\pm}(t - (r_D/c)) - \langle S_{\pm}(t - (r_D/c)) \rangle \quad (\text{D.14})$$

est l'écart de S_{\pm} par rapport à sa valeur moyenne, satisfaisant à

$$\langle \delta S_{\pm}(t - (r_D/c)) \rangle = 0 \quad (\text{D.15})$$

(*) Pour une démonstration plus détaillée, voir par exemple B.R. Mollow, J. Phys. A8, L130 (1975).

Une telle séparation permet de distinguer dans la lumière rayonnée par le dipôle « instantané » S_{\pm} deux composantes. Tout d'abord, le rayonnement du dipôle moyen $\langle S_{\pm} \rangle$ qui est le rayonnement d'un dipôle classique oscillant avec une phase bien définie par rapport au champ laser incident. La lumière rayonnée par $\langle S_{\pm} \rangle$ peut donc interférer avec le champ incident. C'est pourquoi le rayonnement de $\langle S_{\pm} \rangle$ est souvent associé à un processus de *diffusion cohérente*. L'autre composante δS_{\pm} de S_{\pm} rayonne un champ qui n'a pas de phase bien définie par rapport au champ incident puisque ce rayonnement provient de la partie fluctuante du dipôle atomique. La diffusion correspondante est appelée *incohérente*.

c) CONTRIBUTIONS RESPECTIVES DE LA DIFFUSION COHÉRENTE ET INCOHÉRENTE À L'INTENSITÉ TOTALE ÉMISE EN RÉGIME STATIONNAIRE

En régime stationnaire, $\langle S_+(t) \rangle$ et $\langle S_+(t) S_-(t) \rangle$ ne dépendent pas de t . En reportant (D.13) dans (D.7) on obtient

$$\langle I \rangle = \eta^2 \langle S_+ \rangle \langle S_- \rangle + \eta^2 \langle \delta S_+ \delta S_- \rangle \quad (\text{D.16})$$

Le premier terme de (D.16) représente la contribution à $\langle I(t) \rangle$ du dipôle moyen, le second celle des fluctuations du dipôle. Nous appellerons $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ et $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$ ces deux contributions.

Pour calculer $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ et $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$, il suffit d'utiliser la solution stationnaire des équations de Bloch optiques donnée dans le paragraphe C-1-b plus haut. On obtient ainsi, compte tenu de (A.15), (A.16), (A.19) et (C.5) :

$$\frac{1}{\eta^2} \langle I_{\text{coh}} \rangle = |\langle S_+ \rangle|^2 = |u_{st} + i v_{st}|^2 = \frac{1}{2} \frac{s}{(1+s)^2} \quad (\text{D.17})$$

où s est le paramètre de saturation défini en (C.4)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta^2} \langle I_{\text{incoh}} \rangle &= \langle S_+ S_- \rangle - |\langle S_+ \rangle|^2 \\ &= \sigma_{bb}^{st} - |u_{st} + i v_{st}|^2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{s^2}{(1+s)^2} \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

La figure 3 représente les variations de $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ et $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$ avec s (qui est proportionnel à l'intensité laser incidente I_L). Pour des faibles valeurs de I_L ($s \ll 1$), $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ est proportionnel à s , donc à I_L , alors que $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$ est proportionnel à s^2 , donc à I_L^2 . La diffusion est alors essentiellement cohérente et on peut lui associer une section efficace de diffusion, puisque l'intensité totale rayonnée est proportionnelle à

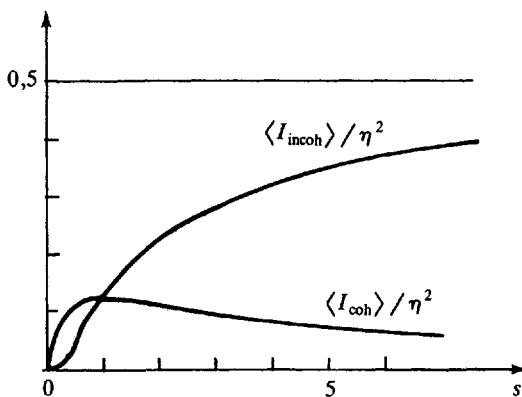


Figure 3. Variations de $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ et $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$ avec le paramètre de saturation s défini en (C.4).

I_L , donc au flux incident. A haute intensité ($s \gg 1$), $\langle I_{\text{coh}} \rangle$ tend vers zéro. En effet, par suite de la saturation de la transition atomique, le dipôle moyen $\langle S_{\pm} \rangle$ tend vers zéro. Par contre, $\langle I_{\text{incoh}} \rangle$ est important et devient pratiquement indépendant de I_L . Un tel résultat exprime que l'atome passe alors la moitié de son temps dans l'état supérieur b . Il ne peut donc émettre plus de $\Gamma/2$ photons par unité de temps, quelle que soit l'intensité incidente. Il apparaît ainsi finalement qu'à haute intensité la diffusion est essentiellement incohérente.

3. Répartition spectrale de la lumière émise en régime stationnaire

a) CONTRIBUTIONS RESPECTIVES DE LA DIFFUSION COHÉRENTE ET INCOHÉRENTE - SPECTRES ÉLASTIQUE ET INÉLASTIQUE

En régime stationnaire, $\langle S_{+} \rangle$ ne dépend pas du temps. Le report de (D.13) dans (D.8) donne :

$$\mathcal{J}(\omega) = \mathcal{J}_{\text{coh}}(\omega) + \mathcal{J}_{\text{incoh}}(\omega) \quad (\text{D.19})$$

où

$$\mathcal{J}_{\text{coh}}(\omega) = \frac{\eta^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_L - \omega)\tau} |\langle S_{+} \rangle|^2 \quad (\text{D.20})$$

$$\mathcal{J}_{\text{incoh}}(\omega) = \frac{\eta^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_L - \omega)\tau} \langle \delta S_{+}(t + \tau) \delta S_{-}(t) \rangle \quad (\text{D.21})$$

L'intégration de (D.20) donne, compte tenu de (D.17) :

$$\mathcal{J}_{\text{coh}}(\omega) = \langle I_{\text{coh}} \rangle \delta(\omega - \omega_L) \quad (\text{D.22})$$

La lumière émise en régime stationnaire par le dipôle moyen est donc monochromatique, de fréquence ω_L . Un tel résultat est bien conforme à l'image physique d'un dipôle moyen oscillant en régime forcé à la fréquence ω_L sous l'effet de l'excitation laser, et rayonnant donc un champ de même fréquence. À la limite des faibles intensités, le processus de diffusion correspondant est bien décrit par le diagramme de diffusion élastique d'ordre le plus bas, représenté sur la figure 29a du chapitre II. Le spectre (D.22) est donc un spectre de diffusion élastique.

La contribution (D.21) de la diffusion incohérente à $\mathcal{I}(\omega)$ n'est autre que la densité spectrale des fluctuations du dipôle. Nous montrons plus loin qu'une telle densité n'est pas monochromatique. C'est pourquoi $\mathcal{I}_{\text{incoh}}(\omega)$ est un spectre de diffusion inélastique.

b) PRINCIPE DU CALCUL DU SPECTRE INÉLASTIQUE

En régime stationnaire, la moyenne à deux temps qui figure dans (D.21) ne dépend pas de t et est égale à $\langle \delta S_+(\tau) \delta S_-(0) \rangle$. Le fait que $S_+ = (S_-)^+$ et l'invariance par translation dans le temps entraînent que

$$\langle \delta S_+(\tau) \delta S_-(0) \rangle = \langle \delta S_+(0) \delta S_-(\tau) \rangle^* = \langle \delta S_+(-\tau) \delta S_-(0) \rangle^*, \quad (\text{D.23})$$

ce qui permet de réécrire (D.21) sous une forme

$$\mathcal{I}_{\text{incoh}}(\omega) = \frac{\eta^2}{2\pi} 2 \operatorname{Re} \int_0^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_L - \omega)\tau} \langle \delta S_+(\tau) \delta S_-(0) \rangle \quad (\text{D.24})$$

qui ne fait plus intervenir que les valeurs positives de τ .

Ecrivons alors les équations de Bloch-Langevin satisfaites par les trois opérateurs $\delta S_q(\tau)$ (avec $q = +, -, z$). Retranchons pour cela de (B.3) l'équation (B.2) satisfait par les valeurs moyennes $\langle S_q \rangle$. Les termes sources λ_q disparaissent et il vient

$$\delta \dot{S}_q(\tau) = \sum_{q'} \mathcal{B}_{qq'} \delta S_{q'}(\tau) + F_q(\tau) \quad (\text{D.25})$$

où $\mathcal{B}_{qq'}$ est la matrice de Bloch et $F_q(\tau)$ la force de Langevin agissant sur $S_q(\tau)$. Comme τ est positif dans (D.24), on peut alors utiliser le théorème de régression quantique, établi dans le complément A_V, et qui indique que, pour $\tau > 0$, les trois moyennes à deux temps $\langle \delta S_q(\tau) \delta S_-(0) \rangle$ obéissent aux mêmes équations que les trois moyennes à un temps $\langle \delta S_q(\tau) \rangle$, c'est-à-dire encore

$$\text{si } \tau > 0 \quad \frac{d}{d\tau} \langle \delta S_q(\tau) \delta S_-(0) \rangle = \sum_{q'} \mathcal{B}_{qq'} \langle \delta S_{q'}(\tau) \delta S_-(0) \rangle \quad (\text{D.26})$$

Il apparaît ainsi que $\langle \delta S_q(\tau) \delta S_-(0) \rangle$ est une superposition de trois

exponentielles $\exp(-r_\lambda \tau)$ où les $-r_\lambda$ ($\lambda = 1, 2, 3$) sont les trois racines caractéristiques de la matrice de Bloch $\mathcal{B}_{qq'}$.

Dans le paragraphe c suivant, nous nous limitons à l'étude de quelques cas limites déjà considérés dans le paragraphe C-1-a plus haut à propos de l'évolution transitoire des moyennes à un temps. Un calcul plus complet peut être fait, utilisant par exemple une transformation de Fourier-Laplace des équations (D.26) (voir références à la fin du chapitre).

c) ALLURE DU SPECTRE INÉLASTIQUE DANS QUELQUES CAS LIMITES

Supposons tout d'abord $\omega_L = \omega_0$ et $\Omega_1 \ll \Gamma$ (excitation résonnante de faible intensité). Nous avons vu plus haut (voir § C-1-a) que deux racines r_λ sont égales à $\Gamma/2$, la troisième à Γ . Le spectre inélastique est formé alors, d'après (D.24), de deux raies de largeur totale à mi-hauteur 2Γ et Γ , centrées toutes deux en ω_L .

Considérons maintenant la limite $|\omega_L - \omega_0| \gg \Omega_1, \Gamma$ qui est celle d'une excitation non résonnante. D'après la formule (C.2) donnée plus haut, le spectre $\mathcal{I}_{\text{incoh}}(\omega)$ est formé de trois raies : une raie centrale en ω_L , de largeur 2Γ (racine r_3) et deux raies latérales centrées en $\omega_L + (\omega_L - \omega_0) = 2\omega_L - \omega_0$ et $\omega_L - (\omega_L - \omega_0) = \omega_0$, de largeur Γ (associées respectivement aux racines r_1 et r_2). Il est possible de comprendre perturbativement un tel spectre. Les deux raies latérales sont associées au processus de diffusion non linéaire d'ordre 2 de la figure 29β du chapitre II (voir aussi la figure 30 de ce chapitre). Quant à la raie centrale de largeur 2Γ , elle peut être interprétée comme étant associée à un processus de diffusion *inverse* à partir de l'état excité b (émission spontanée d'un photon ω à partir de b puis absorption d'un photon laser ω_L et retour dans l'état b), l'atome étant préparé initialement dans l'état b par le processus à trois photons représenté sur la figure 28 du chapitre II.

Enfin, à forte intensité et pour une excitation résonnante ($\Omega_1 \gg \Gamma, \omega_L = \omega_0$), nous pouvons utiliser le résultat (C.1) qui entraîne que le spectre inélastique est formé d'une raie centrale en ω_L de largeur Γ (racine r_3), et de deux raies latérales centrées en $\omega_L + \Omega_1$ et $\omega_L - \Omega_1$ de largeur $3\Gamma/2$ (racines r_1 et r_2)^(*). Il s'agit là du triplet de fluorescence pour lequel il n'est pas possible de donner une interprétation perturbative en termes de processus de diffusion impliquant plusieurs photons. Nous reprendrons ce problème au chapitre VI à

(*) Pour les observations expérimentales de ce spectre, voir F. Schuda, C.R. Stroud and M. Hercher, J. Phys. B7, L 198 (1974) ; R.E. Grove, F.Y. Wu and S. Ezekiel, Phys. Rev. A15, 227 (1977) ; J.D. Cresser, J. Hager, G. Leuchs, M. Rateike and H. Walther, in « Dissipative Systems in Quantum Optics », Topics in Current Physics 27, p. 21, ed. R. Bonifacio (Springer Verlag, 1982).

partir de l'approche atome habillé et nous étudierons également l'autre signal de détection optique :

$$C_2(t, \tau) = \eta^4 \langle S_+(t - (r_D/c))S_+(t + \tau - (r_D/c)) \times \\ \times S_-(t + \tau - (r_D/c))S_-(t - (r_D/c)) \rangle \quad (\text{D.27})$$

qui, pour $\tau > 0$, représente un signal de corrélation de photons.

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

- Equations de Bloch en résonance magnétique nucléaire

Abragam

- Equations de Bloch optiques

Allen and Eberly (chapitre 2), Cohen-Tannoudji

Les solutions transitoires des équations de Bloch peuvent être trouvées dans : H.C. Torrey, Phys. Rev. **76**, 1059 (1949).

- Forces radiatives moyennes

L'étude de ces forces à partir des équations de Heisenberg et du théorème d'Ehrenfest peut être trouvée dans R.J. Cook, Phys. Rev. A**20**, 224 (1979).

Pour des articles de revue sur les forces radiatives et leurs applications, voir

A. Ashkin, Science **210**, 1081 (1980)

R.J. Cook, Comments Atom. Mol. Phys. **10**, 267 (1981)

V.S. Letokhov and V.G. Minogin, Phys. Reports **73**, 1 (1981)

S. Stenholm, Rev. Mod. Phys. **58**, 699 (1986).

- Calcul des signaux de fluorescence à partir des équations de Bloch optiques

B.R. Mollow, Phys. Rev. **188**, 1969 (1969).

Voir aussi les articles de revue de Mollow et Cohen-Tannoudji.

COMPLÉMENT A_V

ÉQUATIONS DE BLOCH-LANGEVIN THÉORÈME DE RÉGRESSION QUANTIQUE

Dans la partie D du chapitre, nous avons montré que les caractéristiques de la lumière émise par un atome excité par un faisceau laser étaient reliées à des « moyennes à deux temps » du dipôle atomique émetteur. Le but de ce complément est de montrer que la dynamique de ces moyennes à deux temps est déterminée par des équations tout à fait analogues aux équations de Bloch optiques. Il s'agit en fait de généraliser à un atome à deux niveaux les résultats obtenus dans le complément C_{IV} pour un oscillateur harmonique. Notons tout de suite qu'une telle généralisation n'est pas immédiate par suite des non-linéarités associées à un système à deux niveaux.

Pour parvenir au résultat cherché, nous commençons (§ 1) par écrire les équations de Heisenberg, pour le dipôle atomique et pour le champ de rayonnement quantique en présence du champ incident supposé monochromatique et de fréquence proche de la fréquence propre atomique. Puis, en résolvant formellement les équations du mouvement des champs, nous décomposons le champ quantique total en deux parties, le champ libre et le champ produit par le dipôle (§ 2). Lorsque cette expression du champ total est reportée dans l'équation de Heisenberg du dipôle atomique, cette dernière prend la forme d'une équation de Langevin. La vitesse de variation des observables atomiques apparaît en effet comme la somme d'une vitesse moyenne analogue à celle des équations de Bloch, et d'une force de Langevin, dont nous montrons qu'elle est nulle en moyenne et fluctue rapidement (§ 3). A partir de ces « équations de Bloch-Langevin », nous établissons enfin le théorème de régression quantique, qui exprime que les corrélations quantiques « régressent » comme les valeurs moyennes.

1. Équations de Heisenberg couplées de l'atome et du champ

Nous considérons exactement le même système que dans le chapitre. Un atome, représenté par un système à deux niveaux, est immobile à l'origine 0 des coordonnées. Il interagit avec le rayonnement incident $E_e(0,t)$ de fréquence ω_L donné en (A.2) et avec le champ de rayonnement quantique $E(0)$, supposé initialement dans l'état vide $|0\rangle$.

a) HAMILTONIEN ET BASE D'OPÉRATEURS DU SYSTÈME

A l'approximation des grandes longueurs d'onde, et dans le point de vue dipolaire électrique, l'hamiltonien du système est celui déjà utilisé dans le chapitre et donné en (A.1). Ecrivons-le sous la forme :

$$H = H_A + H_R + H_{Ie} + H_I \quad (1)$$

H_A est l'hamiltonien atomique dans lequel nous supposons que l'énergie propre dipolaire ϵ_{dip} (voir formule (76) de l'appendice) a été réintégrée. L'atome est assimilé à un système à deux niveaux, et l'origine des énergies est prise égale à celle de l'état fondamental $|a\rangle$, de sorte que H_A s'écrit simplement :

$$H_A = \hbar\omega_0 |b\rangle\langle b| \quad (2)$$

H_R est l'hamiltonien du rayonnement quantique

$$H_R = \int d^3k \sum_{\epsilon \perp k} \hbar\omega [a_\epsilon^+(\mathbf{k})a_\epsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}] \quad (3)$$

Dans l'approximation des grandes longueurs d'onde, la somme sur les modes $\mathbf{k}\epsilon$ est limitée à $|\mathbf{k}| < k_M$, k_M vérifiant la condition de grande longueur d'onde.

L'opérateur moment dipolaire électrique \mathbf{d} est supposé avoir un élément de matrice réel entre $|a\rangle$ et $|b\rangle$, dirigé le long de Oz et noté $d_{ab}\mathbf{e}_z$:

$$\mathbf{d} = (|b\rangle\langle a| + |a\rangle\langle b|) d_{ab} \mathbf{e}_z \quad (4)$$

L'hamiltonien d'interaction avec le rayonnement incident H_{Ie} s'écrit :

$$\begin{aligned} H_{Ie} &= -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t) \\ &= \hbar\Omega_1 (|b\rangle\langle a| + |a\rangle\langle b|) \cos\omega_L t \end{aligned} \quad (5)$$

où Ω_1 est la fréquence de Rabi définie par (A.5). Enfin, H_I est l'hamiltonien d'interaction avec le champ quantique :

$$\begin{aligned} H_I &= -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \\ &= -d_{ab} E_{\perp z}(\mathbf{0}) (|b\rangle\langle a| + |a\rangle\langle b|) \end{aligned} \quad (6)$$

Rappelons que le champ $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$ est défini par l'expression (89) de l'appendice

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) = i \int d^3k \sum_{\epsilon \perp k} \mathcal{E}_\omega (a_\epsilon(\mathbf{k}) \epsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a_\epsilon^+(\mathbf{k}) \epsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (7)$$

dans laquelle la somme sur \mathbf{k} est limitée à $|\mathbf{k}| < k_M$.

L'équivalence du système à deux niveaux avec un spin $\frac{1}{2}$, décrite au

paragraphe A-4 du chapitre, permet d'exprimer toute observable atomique comme combinaison linéaire des quatre opérateurs

$$\{\mathcal{S}_+, \mathcal{S}_z, \mathcal{S}_-, \mathbb{1}\} \quad (8)$$

avec

$$\mathcal{S}_+ = |b\rangle\langle a| \quad (9.a)$$

$$\mathcal{S}_- = |a\rangle\langle b| \quad (9.b)$$

$$\mathcal{S}_z = \frac{1}{2} [|b\rangle\langle b| - |a\rangle\langle a|] \quad (9.c)$$

$\mathbb{1}$ étant l'opérateur unité. Ainsi,

$$H_A = \hbar\omega_0[\mathcal{S}_z + \frac{1}{2}] \quad (10.a)$$

$$H_{Ie} + H_I = [\hbar\Omega_1 \cos \omega_L t - d_{ab} E_{\perp z}(\mathbf{0})] (\mathcal{S}_+ + \mathcal{S}_-) \quad (10.b)$$

De la même façon, les observables du champ s'expriment en fonction des opérateurs

$$\{..., a_e(\mathbf{k}), a_e^+(\mathbf{k}), ... \} \quad (11)$$

de sorte que la connaissance de l'évolution des opérateurs (8) et (11) suffit à déterminer l'évolution du système total.

b) ÉQUATIONS D'ÉVOLUTION DES OBSERVABLES DE L'ATOME ET DU CHAMP

Dans le point de vue de Heisenberg, les opérateurs atomiques dépendent du temps, et leurs relations de commutation à un instant t donné,

$$[\mathcal{S}_+(t), \mathcal{S}_-(t)] = -2\mathcal{S}_z(t) \quad (12.a)$$

$$[\mathcal{S}_z(t), \mathcal{S}_{\pm}(t)] = \pm \mathcal{S}_{\pm}(t) \quad (12.b)$$

permettent d'expliciter l'équation de Heisenberg

$$\dot{A}(t) = \frac{1}{i\hbar} [A(t), H(t)] \quad (13)$$

pour chacun des trois opérateurs \mathcal{S}_+ , \mathcal{S}_- , \mathcal{S}_z . Il vient ainsi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{S}_+(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{S}_+(t), \hbar\omega_0(\mathcal{S}_z(t) + \frac{1}{2})] + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{S}_+(t), \mathcal{S}_+(t) + \mathcal{S}_-(t)] (\hbar\Omega_1 \cos \omega_L t - d_{ab} E_{\perp z}(\mathbf{0}, t)) \\ &= i\omega_0 \mathcal{S}_+(t) - 2i \mathcal{S}_z(t) \left(\Omega_1 \cos \omega_L t - \frac{d_{ab}}{\hbar} E_{\perp z}(\mathbf{0}, t) \right) \end{aligned} \quad (14)$$

L'adjoint de (14) donne l'équation pour $\mathcal{S}_-(t)$:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{S}_-(t) = -i\omega_0 \mathcal{S}_-(t) + 2i\mathcal{S}_z(t) \left(\Omega_1 \cos \omega_L t - \frac{d_{ab}}{\hbar} E_{\perp z}(0,t) \right) \quad (15)$$

De la même façon, on obtient pour $\mathcal{S}_z(t)$:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{S}_z(t) = -i(\mathcal{S}_+(t) - \mathcal{S}_-(t)) \left(\Omega_1 \cos \omega_L t - \frac{d_{ab}}{\hbar} E_{\perp z}(0,t) \right) \quad (16)$$

Nous avons utilisé, pour établir ces équations, le fait que l'opérateur champ $E_{\perp z}(0,t)$ commute avec les opérateurs atomiques au même instant.

L'évolution du champ est entièrement déterminée par celle des opérateurs $a_\epsilon(\mathbf{k})$ et de leurs adjoints. L'opérateur $a_\epsilon(\mathbf{k})$ commute avec les opérateurs atomiques pris au même instant, et vérifie les relations de commutations habituelles des opérateurs création et annihilation. Son équation de Heisenberg s'écrit :

$$\begin{aligned} \dot{a}_\epsilon(\mathbf{k},t) &= \frac{1}{i\hbar} [a_\epsilon(\mathbf{k},t), H(t)] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [a_\epsilon(\mathbf{k},t), H_R(t) - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(0,t)] \\ &= -i\omega a_\epsilon(\mathbf{k},t) + \frac{1}{\hbar} \mathcal{E}_\omega \epsilon \cdot \mathbf{d}(t) \end{aligned} \quad (17)$$

c) APPROXIMATION DU CHAMP TOURNANT. CHANGEMENT DE VARIABLES

Comme dans le chapitre, nous nous intéressons uniquement aux processus radiatifs quasi résonnantes et faisons donc l'approximation du champ tournant. Dans le point de vue de Heisenberg, une telle approximation consiste à négliger au second membre des équations du mouvement (14), (15), (16), (17) les termes de couplage entre l'atome et le champ dont les fréquences propres sont très différentes de celles de l'opérateur figurant au premier membre. Par exemple, dans l'équation (14), nous ne gardons que la composante $(\exp i\omega_L t)/2$ de $\cos \omega_L t$ et que les termes en $a_\epsilon^+(\mathbf{k})$ de $E_{\perp z}(0,t)$. Il est également commode d'introduire des opérateurs dont les vitesses de variation sont lentes par rapport aux fréquences optiques. Pour l'atome, nous utilisons ainsi les opérateurs S_+ , S_z , S_- , définis par (A.15). Pour le champ, nous utilisons les opérateurs :

$$a_\epsilon(\mathbf{k},t) = \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k},t) e^{-i\omega t}$$

Les équations (14), (15), (16), (17) deviennent ainsi

$$\dot{S}_+(t) = -i\delta_L S_+(t) - i\Omega_1 S_z(t) + 2i \frac{d_{ab}}{\hbar} E_z^{(c)}(\mathbf{0},t) e^{-i\omega_L t} S_z(t) \quad (18.a)$$

$$\dot{S}_-(t) = i\delta_L S_-(t) + i\Omega_1 S_z(t) - 2i \frac{d_{ab}}{\hbar} E_z^{(a)}(\mathbf{0},t) e^{i\omega_L t} S_z(t) \quad (18.b)$$

$$\begin{aligned} \dot{S}_z(t) = & i \frac{\Omega_1}{2} (S_-(t) - S_+(t)) + i \frac{d_{ab}}{\hbar} E_z^{(a)}(\mathbf{0},t) e^{i\omega_L t} S_+(t) - \\ & - i \frac{d_{ab}}{\hbar} E_z^{(c)}(\mathbf{0},t) e^{-i\omega_L t} S_-(t) \end{aligned} \quad (18.c)$$

$$\hat{a}_e(\mathbf{k},t) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{E}_\omega \varepsilon_z d_{ab} S_-(t) e^{i(\omega - \omega_L)t} \quad (19)$$

où δ_L a été défini en (A.14)

$$\delta_L = \omega_L - \omega_0 \quad (20)$$

et où $E_z^{(a)}$ et $E_z^{(c)}$ sont les parties de $E_{\perp z}$ comprenant respectivement les opérateurs annihilation et création des différents modes. En utilisant les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+ , elles s'écrivent :

$$E_z^{(a)}(\mathbf{0},t) = \int d^3k \sum_e i \varepsilon_z \mathcal{E}_\omega \hat{a}_e(\mathbf{k},t) e^{-i\omega t} \quad (21)$$

$$E_z^{(c)}(\mathbf{0},t) = (E_z^{(a)}(\mathbf{0},t))^+ \quad (22)$$

Notons qu'en l'absence d'interaction entre l'atome et les modes vides du rayonnement, les équations (18) forment un système d'équations linéaires à coefficients constants dont les fréquences propres sont celles du spin dans le référentiel tournant, c'est-à-dire $\pm \sqrt{\Omega_1^2 + \delta_L^2}$ et 0, tandis que $\hat{a}_e(\mathbf{k})$ est constant. D'après les hypothèses faites, ces fréquences sont petites par rapport à ω_L et ω_0 .

d) COMPARAISON AVEC LE CAS DE L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

Pour établir l'équation de Heisenberg-Langevin relative à l'atome, nous suivrons dans le paragraphe suivant une démarche tout à fait semblable à celle du complément C_{IV}, où l'atome était représenté par un oscillateur harmonique. Comparons auparavant les équations de Heisenberg des deux systèmes.

L'équation (19) est tout à fait semblable à l'équation (33) de C_{IV} qui donnait l'évolution de \hat{a}_i . Elle s'intègre formellement de la même façon :

$$\hat{a}_e(\mathbf{k},t) = \hat{a}_e(\mathbf{k},t_0) + \frac{\varepsilon_z \mathcal{E}_\omega d_{ab}}{\hbar} \int_0^{t-t_0} d\tau S_-(t-\tau) e^{i(\omega - \omega_L)(t-\tau)} \quad (23)$$

Multipliés par $\exp(-i\omega t)$ et portés dans l'expression quantique des champs, les deux termes de (23) donnent respectivement le champ initial ayant évolué librement de t_0 à t , et le champ créé par le dipôle atomique entre ces deux instants. Les deux termes de (23) représentent donc ce qu'on nomme habituellement le « champ libre » et le « champ des sources » (voir références à la fin du chapitre).

Les trois équations (18) sont l'équivalent de l'équation du mouvement (32) de \hat{b} dans C_{IV} , et de celle de \hat{b}^+ . On peut noter une première différence entre ces équations : le champ *extérieur* introduit des couplages entre les évolutions de S_+ , S_z , S_- , alors que \hat{b} et \hat{b}^+ évoluent indépendamment en l'absence de couplage avec le réservoir. Toutefois cette différence n'est pas essentielle, car on pourrait combiner linéairement les trois équations (18) et faire apparaître les modes propres d'évolution des observables atomiques en présence du champ extérieur. Une deuxième différence plus importante tient à la forme des termes de couplage avec le réservoir, représenté ici par le champ quantique dans l'état vide. Alors que ces termes de couplage ne dépendaient que d'opérateurs du réservoir, jouant ainsi le rôle de termes sources dans l'équation du mouvement de \hat{b} , ils apparaissent ici comme des *produits* d'un opérateur atomique par un opérateur du champ. Cette propriété est reliée au fait que la réponse du système à deux niveaux à un champ est *non linéaire* (la réponse à la somme de deux champs n'est pas la somme des réponses à chacun d'eux). Elle rend plus délicat le passage à l'équation de Heisenberg-Langevin, car il faut faire attention à *l'ordre* dans lequel sont écrits les deux opérateurs du produit. Les opérateurs atomiques $S_q(t)$ ($q = +, z, -$) et ceux du champ, $E_z^{(a)}(\mathbf{0},t)$ et $E_z^{(c)}(\mathbf{0},t)$, commutent lorsqu'ils sont pris au même instant. Il n'en est pas de même pour le champ libre et le champ des sources séparément. En effet, le champ libre dépend de $\hat{a}_e(\mathbf{k},t_0)$ alors que le champ des sources dépend de $S_\pm(t-\tau)$ (premier et deuxième termes de (23)). Ces deux opérateurs ne commutent pas nécessairement avec $S_q(t)$. Ainsi, les termes de couplage avec le champ libre et le champ des sources se présenteront de façon différente suivant l'ordre choisi pour écrire le produit de $S_q(t)$ par $E_{\perp z}(\mathbf{0},t)$. Nous utiliserons cette possibilité dans le paragraphe suivant pour simplifier au maximum les calculs.

2. Etablissement des équations de Heisenberg-Langevin

Dans les équations (18), les champs $E_z^{(a)}(\mathbf{0},t)$ et $E_z^{(c)}(\mathbf{0},t)$ sont maintenant décomposés en une partie « champ libre » et une partie « champ des sources ».

$$E_z^{(a)}(\mathbf{0},t) = E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0},t) + E_{sz}^{(a)}(\mathbf{0},t) \quad (24.a)$$

$$E_z^{(c)}(\mathbf{0},t) = E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0},t) + E_{sz}^{(c)}(\mathbf{0},t) \quad (24.b)$$

où

$$E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0},t) = \int d^3k \sum_{\epsilon} i \epsilon_z \mathcal{E}_{\omega} \hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k},t_0) e^{-i\omega t} \quad (25)$$

$$E_{sz}^{(a)}(\mathbf{0},t) = \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{i}{\hbar} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 d_{ab} \hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k},t_0) e^{-i\omega_L t} \times \\ \times \int_0^{t-t_0} d\tau S_{-}(t-\tau) e^{-i(\omega - \omega_L)\tau} \quad (26)$$

et

$$E_{0z}^{(c)} = (E_{0z}^{(a)})^+ ; \quad E_{sz}^{(c)} = (E_{sz}^{(a)})^+ \quad (27)$$

a) CHOIX DE L'ORDRE NORMAL

Nous aurons plus tard à prendre la moyenne dans le vide des équations (18), ou d'équations analogues donnant l'évolution de produits d'opérateurs atomiques, qui s'en déduisent aisément. Il est alors commode de faire figurer, dans les produits d'opérateurs, les opérateurs $\hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k},t_0)$ à droite et les opérateurs $\hat{a}_{\epsilon}^+(\mathbf{k},t_0)$ à gauche, dans la mesure où les relations

$$\hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k},t_0)|0\rangle = 0 \quad (28.a)$$

$$\langle 0 | \hat{a}_{\epsilon}^+(\mathbf{k},t_0) = 0 \quad (28.b)$$

peuvent être utilisées pour tous les modes \mathbf{k}, ϵ . Ainsi, dans les seconds membres des équations (18), plaçons les opérateurs $E_z^{(a)}(\mathbf{0},t)$ à droite des opérateurs $S_q(t)$, et les opérateurs $E_z^{(c)}(\mathbf{0},t)$ à gauche (ce qui est possible puisque ces opérateurs commutent). Les contributions de $E_{0z}^{(a)}$ et $E_{0z}^{(c)}$ à ces termes seront alors nulles en moyenne. Seuls les champs des sources $E_{sz}^{(a)}$ et $E_{sz}^{(c)}$ contribueront aux moyennes. Cette façon d'ordonner les opérateurs correspond à ce qu'on appelle l'ordre normal. Avec ce choix, explicitons par exemple l'équation (18.a) à l'aide de (24.b), (27) et (26) :

$$\dot{S}_+(t) = -i\delta_L S_+(t) - i\Omega_1 S_z(t) + \frac{2id_{ab}}{\hbar} E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0},t) e^{-i\omega_L t} S_z(t) + \\ + 2 \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \int d^3k \sum_{\epsilon} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 \int_0^{t-t_0} d\tau e^{i(\omega - \omega_L)\tau} S_+(t-\tau) S_z(t) \quad (29)$$

L'avant dernier terme provient de $E_{0z}^{(c)}$. Il est nul en moyenne dans le

vide et nous verrons plus loin que ce terme peut être considéré comme la force de Langevin $F_+(t)$ agissant sur S_+ . Le dernier terme représente la contribution du champ des sources que nous allons maintenant évaluer. Auparavant notons que l'équation pour $S_-(t)$ s'obtient en prenant l'hermitique conjugué de (29), tandis que l'équation pour $S_z(t)$ s'écrit

$$\begin{aligned} \dot{S}_z(t) = & \frac{i\Omega_1}{2} (S_-(t) - S_+(t)) + \frac{id_{ab}}{\hbar} [e^{i\omega_L t} S_+(t) E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t) - h.c.] - \\ & - \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \int d^3k \sum_i \varepsilon_z^2 \mathcal{E}_\omega^2 \int_0^{t-t_0} d\tau [e^{-i(\omega - \omega_L)\tau} S_+(t) S_-(t-\tau) + h.c.] \end{aligned} \quad (30)$$

b) CONTRIBUTION DU CHAMP DES SOURCES

Les derniers termes de (29) et (30) se présentent sous la forme d'une intégrale sur τ du produit de $S_q(t-\tau)$ par la fonction

$$f(\tau) = \int d^3k \sum_i \varepsilon_z^2 \mathcal{E}_\omega^2 e^{-i(\omega - \omega_L)\tau} \quad (31)$$

ou par $f^*(\tau)$. Les opérateurs $S_q(t-\tau)$ sont des fonctions lentement variables de τ à l'échelle des fréquences ω_0 et ω_L . Au contraire, l'intégrale sur \mathbf{k} dans (31) conduit à sommer sur un spectre de fréquences très large (entre 0 et ck_M), de sorte que la fonction $f(\tau)$ est très étroite en τ autour de $\tau = 0$, de largeur $1/ck_M$. Sur un intervalle de temps aussi court, il est raisonnable d'approximer l'évolution de $S_q(t-\tau)$ par son évolution non perturbée. On peut choisir pour une telle évolution, soit celle en présence du champ extérieur qui se fait aux fréquences $\pm \sqrt{\Omega_1^2 + \delta_L^2}$ et 0, soit l'évolution en absence de tout couplage avec le champ qui se fait aux fréquences $\pm \delta_L$ et 0. Ces deux choix conduisent à des résultats identiques à des termes en Ω_1/ω_0 ou δ_L/ω_0 près, qui sont du même ordre que ceux négligés dans l'approximation du champ tournant. Nous prendrons ici la deuxième option, qui donne des expressions comparables directement à celles utilisées dans le chapitre pour les équations de Bloch. Nous remplaçons donc dans (29) et (30) $S_\pm(t-\tau)$ par

$$S_\pm(t-\tau) = S_\pm(t) e^{\pm i\delta_L \tau} \quad (32)$$

Apparaissent ainsi dans le dernier terme de (29), d'une part l'opérateur $S_+(t)S_z(t)$ qui, d'après l'algèbre des matrices de Pauli, est égal à

$-S_+(t)/2$, d'autre part l'intégrale

$$\begin{aligned} & 2 \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \int d^3k \sum_{\epsilon} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 \int_0^{t-t_0} d\tau e^{i(\omega - \omega_0)\tau} = \\ & = 2 \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 \left[-i \mathcal{P} \frac{1}{(\omega_0 - \omega)} + \pi \delta(\omega - \omega_0) \right] \\ & = 2 \left[-i \Delta + \frac{\Gamma}{2} \right] \end{aligned} \quad (33)$$

où Γ est le taux d'émission spontanée à partir du niveau b (formule (E.4.a) du chapitre IV) et $\hbar\Delta$ le déplacement radiatif du niveau b (formule (E.7.b) du même chapitre ; à l'approximation du champ tournant, le déplacement radiatif du niveau a est nul). La contribution du champ des sources au deuxième membre de (29) s'écrit donc finalement

$$\left(-\frac{\Gamma}{2} + i \Delta \right) S_+(t) \quad (34)$$

En procédant de la même façon, on trouve pour la contribution du champ des sources à (30) :

$$\begin{aligned} & -\frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \int d^3k \sum_{\epsilon} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 \times \\ & \times \int_0^{t-t_0} d\tau [e^{-i(\omega - \omega_0)\tau} S_+(t) S_-(t) + e^{i(\omega - \omega_0)\tau} S_-(t) S_+(t)] = \\ & = -\Gamma S_+(t) S_-(t) = -\Gamma \left(S_z(t) + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (35)$$

c) RÉCAPITULATION. DISCUSSION PHYSIQUE

Compte tenu de (34) et (35), les équations du mouvement de $S_+(t)$, $S_z(t)$, $S_-(t)$ s'écrivent :

$$\dot{S}_+(t) = - \left(i \tilde{\delta}_L + \frac{\Gamma}{2} \right) S_+(t) - i \Omega_1 S_z(t) + F_+(t) \quad (36.a)$$

$$\dot{S}_z(t) = -i \frac{\Omega_1}{2} S_+(t) - \Gamma S_z(t) + i \frac{\Omega_1}{2} S_-(t) - \frac{\Gamma}{2} + F_z(t) \quad (36.b)$$

$$\dot{S}_-(t) = i \Omega_1 S_z(t) - \left(-i \tilde{\delta}_L + \frac{\Gamma}{2} \right) S_-(t) + F_-(t) \quad (36.c)$$

où

$$\tilde{\delta}_L = \omega_L - \omega_0 - \Delta \quad (36.d)$$

est le désaccord entre la fréquence du laser ω_L et la fréquence atomique

corrigée du déplacement radiatif Δ , et où les forces de Langevin sont données par

$$F_+(t) = \frac{2id_{ab}}{\hbar} E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0},t) e^{-i\omega_L t} S_z(t) \quad (37.a)$$

$$F_z(t) = i \frac{d_{ab}}{\hbar} [e^{i\omega_L t} S_+(t) E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0},t) - h.c.] \quad (37.b)$$

$$F_-(t) = -\frac{2id_{ab}}{\hbar} e^{i\omega_L t} S_z(t) E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0},t) \quad (37.c)$$

Dans la suite, nous prendrons les valeurs moyennes des opérateurs du point de vue de Heisenberg dans un état du système global de la forme $|\psi_A;0\rangle$ représentant l'atome dans l'état $|\psi_A\rangle$ en présence du champ quantique dans l'état vide. Les valeurs moyennes des forces de Langevin (37) dans un tel état sont nulles grâce aux relations (28). Il reste à montrer que leur temps de corrélation est court, ce que nous ferons au paragraphe suivant.

Les équations (36) sont les équations de Bloch-Langevin. Elles ne diffèrent des équations de Bloch (A.18) que par les forces de Langevin. En valeur moyenne dans le vide, elles redonnent exactement les équations de Bloch, de sorte que la dérivation des équations (36) donnée dans ce complément constitue une justification de l'approximation des vitesses de variation indépendantes, moyennant les hypothèses $|\delta_L|, \Omega_1 \ll \omega_L, \omega_0$.

Revenons pour terminer sur l'interprétation physique des calculs présentés dans ce paragraphe. Ils pourraient laisser croire que l'amortissement et le déplacement radiatifs sont dûs uniquement à l'interaction de l'atome avec son propre champ (réaction de rayonnement) alors que les fluctuations du champ libre n'interviennent que dans les forces de Langevin. Il faut cependant préciser qu'un autre choix que l'ordre normal aurait conduit à des conclusions différentes, l'effet global sur l'évolution de $\langle S_q \rangle$ restant bien sûr le même.

En fait, pour pouvoir donner une interprétation physique à chacune des vitesses de variation, celle due à la réaction de rayonnement, et celle due aux fluctuations du vide, il faut veiller à ne considérer que des grandeurs hermitiques du système, et à imposer que leurs diverses vitesses de variations soient séparément hermitiques. On peut montrer alors (*) que ces conditions ne sont satisfaites que si les produits $S_q(t) E_{\perp z}(\mathbf{0},t)$ avec $(q = x, y, z)$ sont symétrisés. Les conclusions qui en découlent concernant le rôle de la réaction de rayonnement et celui des fluctuations du vide sont alors en plein accord avec celles exposées dans le complément A_{IV}.

(*) J. Dalibard, J. Dupont-Roc et C. Cohen-Tannoudji, *J. Physique*, **43** (1982) 1617 ; **45**, (1984) 637.

Remarque

On peut noter que dans (23) le terme relatif au champ des sources ne dépend que de ω et ϵ_r . Il est donc pair en \mathbf{k} . Il en résulte que le champ des sources est pair en \mathbf{r} . En particulier, son gradient à l'origine est nul. La force exercée sur l'atome par son champ propre est ainsi nulle, comme nous l'avons admis dans le paragraphe (C-2-a) du chapitre. Il en est d'ailleurs de même de la force moyenne due au champ du vide (25). Pour le voir, il suffit par exemple de choisir l'ordre normal dans l'expression (C.14).

3. Propriétés des forces de Langevin

Nous avons montré dans le paragraphe 2 précédent que les trois opérateurs $S_q(t)$ ($q = +, z, -$) obéissent aux équations de Bloch-Langevin (36) qui peuvent être écrites sous la forme

$$\frac{d}{dt} S_q(t) = \sum_{q'} \mathcal{B}_{qq'} S_{q'}(t) + \lambda_q + F_q(t) \quad (38)$$

où les $\mathcal{B}_{qq'}$ et λ_q sont des coefficients constants identiques à ceux qui figurent dans les équations de Bloch optiques (A.18), et où les $F_q(t)$ sont des forces, données en (37), et de valeur moyenne nulle

$$\langle F_q(t) \rangle = 0 \quad (39)$$

Pour pouvoir considérer ces forces comme des forces de Langevin, il nous faut maintenant calculer leurs fonctions de corrélation et montrer qu'elles sont caractérisées par un temps de corrélation τ_c très court devant Γ^{-1} . Nous allons pour cela établir que

$$\mathcal{G}_{qq'}(t, t') = \langle F_q^+(t) F_{q'}(t') \rangle = 2 D_{qq'} g(t - t') \quad (40)$$

où $D_{qq'}$ est un « coefficient de diffusion », de l'ordre de Γ , et où $g(t - t')$ est une fonction de $t - t'$ de largeur $\tau_c = 1/c k_M$ et d'intégrale égale à 1 (qui n'est pas forcément paire en $t - t'$ par suite du caractère quantique des forces F_q).

Dans le cas de l'oscillateur harmonique étudié dans le complément C_{IV} , les forces de Langevin ne dépendent que des opérateurs du champ, et le calcul de leurs fonctions de corrélation est très facile. Les expressions (37) montrent que les forces de Langevin du système à deux niveaux sont des produits d'opérateurs du champ libre et d'opérateurs atomiques. Le calcul de leurs fonctions de corrélation nécessite donc la connaissance préalable des relations de commutation entre opérateurs atomiques et opérateurs du champ libre (*).

(*) Voir aussi B.R. Mollow, J. Phys. A8, L130 (1975).

a) RELATIONS DE COMMUTATION ENTRE DIPÔLE ATOMIQUE ET CHAMP LIBRE

Explicitons le commutateur $[S_q(t_2), E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t_1)]$ à l'aide de (25) :

$$[S_q(t_2), E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t_1)] = \int d^3k \sum_{\epsilon} i \epsilon_z \mathcal{E}_{\omega} [S_q(t_2), \hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k}, t_0)] e^{-i\omega t_1} \quad (41)$$

Grâce à (23), on peut réexprimer $\hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k}, t_0)$ en fonction de $\hat{a}_{\epsilon}(\mathbf{k}, t_2)$, qui commute avec $S_q(t_2)$ puisqu'il est pris au même instant, et du champ des sources. Il vient

$$\begin{aligned} [S_q(t_2), E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t_1)] &= - \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{i}{\hbar} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 d_{ab} \times \\ &\quad \times \int_0^{t_2 - t_0} d\tau [S_q(t_2), S_{-}(t_2 - \tau)] e^{-i\omega t_1} e^{i(\omega - \omega_L)(t_2 - \tau)} \end{aligned} \quad (42)$$

La somme sur \mathbf{k} et ϵ fait apparaître à nouveau la fonction f introduite en (31), mais avec l'argument $\tau - (t_2 - t_1)$. La fonction f est très étroite, de largeur $1/ck_M$ autour de 0, et l'intégrale sur τ s'étend uniquement aux valeurs de τ positives puisque $t_2 - t_0$ est positif.

Supposons tout d'abord $t_2 < t_1$, plus précisément $t_2 - t_1 \ll -1/ck_M$. L'intégrale de $f(\tau - (t_2 - t_1))$ est alors nulle puisque l'intervalle d'intégration $[0, t_2 - t_0]$ ne contient pas l'intervalle de largeur $1/ck_M$ autour de $t_2 - t_1$ dans lequel f est appréciable. Il s'ensuit que :

$$[S_q(t_2), E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t_1)] \approx 0 \quad \text{si } t_2 \ll t_1 - (1/ck_M) \quad (43)$$

Un tel résultat est satisfaisant physiquement. L'opérateur $S_q(t_2)$ ne dépend en effet que du champ du vide $E_0^{(\pm)}(\mathbf{0}, t')$ qui a agi sur le dipôle atomique à des instants t' situés dans le passé de t_2 ($t' < t_2$). Cet opérateur commute donc avec le champ du vide $E_0^{(\pm)}(\mathbf{0}, t_1)$ dans le futur de t_2 ($t_1 > t_2$) (*).

Supposons maintenant $|t_2 - t_1| \leq 1/ck_M$. L'intégrale sur τ de (42) n'est plus nulle et peut être calculée au moyen de l'approximation (32) qui s'écrit ici

$$S_{-}(t_2 - \tau) \approx S_{-}(t_1) e^{-i\delta_L(\tau - t_2 + t_1)} \quad (44)$$

et il vient

$$\begin{aligned} [S_q(t_2), E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t_1)] &\approx -[S_q(t_2), S_{-}(t_1)] e^{-i\omega_L t_1} \times \\ &\quad \times \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{d_{ab}}{\hbar} \epsilon_z^2 \mathcal{E}_{\omega}^2 [\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_0} + i\pi \delta(\omega - \omega_0)] e^{i(\omega - \omega_0)(t_2 - t_1)} \end{aligned} \quad (45)$$

(*) Rappelons en effet que le commutateur $[E_{0j}^{(+)}(\mathbf{r}_1, t_1), E_{0j}^{(-)}(\mathbf{r}_2, t_2)]$ n'est différent de zéro que si les deux événements (\mathbf{r}_1, t_1) et (\mathbf{r}_2, t_2) sont situés sur un même cône de lumière.

C'est une fonction de t_1 et t_2 , dont l'ordre de grandeur est celui de $\Gamma \hbar / d_{ab}$. En prenant l'hermitique conjuguée de (43) et (45), on obtient des relations analogues pour $E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0}, t)$.

b) CALCUL DES FONCTIONS DE CORRÉLATION DES FORCES DE LANGEVIN

Calculons par exemple la fonction de corrélation $\mathcal{G}_{++} = \langle F_+(t)F_+(t') \rangle$ où F_+ est défini en (37.a)

$$\mathcal{G}_{++}(t, t') = \frac{4d_{ab}^2}{\hbar^2} \langle S_z(t)E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t)e^{i\omega_L(t-t')} E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0}, t') S_z(t') \rangle \quad (46)$$

Inversons l'ordre des deux champs. L'équation (25) donne

$$\begin{aligned} e^{i\omega_L(t-t')} [E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t), E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0}, t')] &= \\ = \int d^3k \sum_i \varepsilon_i^2 \mathcal{E}_\omega^2 e^{-i(\omega - \omega_L)(t-t')} &= f(t - t') \end{aligned} \quad (47)$$

On retrouve la fonction f définie par l'expression (31). La fonction $f(t - t')$ est centrée en $t - t' = 0$ et a une largeur de l'ordre de $1/ck_M$. L'expression (46) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{++}(t, t') &= \frac{4d_{ab}^2}{\hbar^2} \langle S_z(t)S_z(t') \rangle f(t - t') + \\ + 4 \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} \langle S_z(t)E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0}, t') E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t) S_z(t') \rangle e^{i\omega_L(t-t')} & \end{aligned} \quad (48)$$

Dans le premier terme, $S_z(t')$ est lentement variable à l'échelle de la largeur $1/ck_M$ de la fonction $f(t - t')$. On peut donc remplacer t' par t . Il apparaît ainsi $S_z^2(t)$ qui vaut $1/4$. On peut noter que l'intégrale sur t de ce premier terme de $-\infty$ à $+\infty$ n'est autre, compte tenu de (31), que la somme sur tous les modes de $(d_{ab}^2/\hbar^2)\varepsilon_i^2 \mathcal{E}_\omega^2 2\pi \delta(\omega - \omega_L)$. D'après (33), cette somme est égale à Γ . Ainsi, ce premier terme peut s'écrire simplement $\Gamma g(t - t')$ où $g(\tau)$, proportionnel à $f(\tau)$, est une fonction de τ de largeur $1/ck_M$ et d'intégrale 1. Le deuxième terme de (48) est négligeable : en effet, si $|t - t'| \gg 1/ck_M$, on peut utiliser (43) et son analogue pour $E_{0z}^{(c)}$, pour faire commuter, soit $S_z(t)$ avec $E_{0z}^{(c)}(\mathbf{0}, t')$, soit $E_{0z}^{(a)}(\mathbf{0}, t)$ avec $S_z(t')$ suivant le signe de $t - t'$. L'un ou l'autre de ces champs agit alors directement sur l'état $|\psi_A; 0\rangle$ qui intervient dans la valeur moyenne de (46) et donne un résultat nul ; si $|t - t'| \leq 1/ck_M$, les commutateurs précédents restent finis, de l'ordre $\Gamma \hbar / d_{ab}$ d'après (45), de sorte que le second terme est de l'ordre de $(d_{ab}^2/\hbar^2)(\Gamma \hbar / d_{ab})^2 = \Gamma^2$. Dans le même intervalle de largeur $1/ck_M$, le premier terme vaut $\Gamma(ck_M) \gg \Gamma^2$. Il est ainsi justifié de négliger le

second terme de (48) par rapport au premier et il reste finalement :

$$\mathcal{G}_{++}(t, t') = \Gamma g(t - t') \quad (49.a)$$

ce qui donne

$$2D_{++} = \Gamma \quad (49.b)$$

Des calculs analogues donnent pour les autres coefficients de diffusion

$$D_{--} = D_{-+} = D_{+-} = D_{z-} = D_{-z} = 0 \quad (50.a)$$

$$2D_{zz} = \Gamma (\langle S_z \rangle + \frac{1}{2}) \quad (50.b)$$

$$2D_{z+} = \Gamma \langle S_+ \rangle \quad (50.c)$$

$$2D_{+z} = \Gamma \langle S_- \rangle \quad (50.d)$$

c) THÉORÈME DE RÉGRESSION QUANTIQUE

Ce théorème est une conséquence des propriétés (39) et (40) des forces de Langevin, et de l'existence de deux échelles de temps très distinctes, Γ^{-1} et $\tau_c = 1/ck_M$, avec $\tau_c \ll \Gamma^{-1}$. Pour l'établir, nous suivons une démarche très analogue à celle du complément C_{IV} . Nous nous contenterons d'en donner ici les grandes lignes.

Comme dans le paragraphe 2-d du complément C_{IV} , nous commençons par établir que

$$\langle F_q(t) S_{q'}(t') \rangle = 0 \quad \text{si } t - t' \gg \tau_c \quad (51)$$

Il suffit pour cela d'intégrer formellement le système d'équations linéaires (38) pour montrer que $S_{q'}(t')$ dépend linéairement des forces de Langevin $F_{q''}(t'')$ dans le passé de t' et ne peut être donc corrélé, compte tenu de (40), avec la force de Langevin $F_q(t)$ pour t suffisamment loin dans le futur de t' .

Multiplions alors les deux membres de (38) par $S_{q'}(t')$ (après avoir remplacé l'indice de sommation q' par q'') et prenons la valeur moyenne. Il vient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_q(t) S_{q'}(t') \rangle &= \sum_{q''} \mathcal{B}_{qq''} \langle S_{q''}(t) S_{q'}(t') \rangle + \\ &+ \lambda_q \langle S_{q'}(t') \rangle + \langle F_q(t) S_{q'}(t') \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

Pour $t - t' \gg \tau_c$, le dernier terme de (52) est négligeable compte tenu de (51). Pour $t - t' \leq \tau_c$, on peut montrer qu'il reste fini et de l'ordre de $D_{qq'}$, c'est-à-dire de l'ordre de Γ , de sorte que sa contribution à la solution de (52) pour $t \geq t'$ est de l'ordre de $\Gamma \tau_c \ll 1$. Finalement, on peut ignorer le dernier terme de (52) pour $t \geq t'$. Ceci montre que les moyennes à deux temps $\langle S_q(t) S_{q'}(t') \rangle$ obéissent, pour $t \geq t'$, à des

équations

$$\text{si } t \geq t' \quad \frac{d}{dt} \langle S_q(t)S_{q'}(t') \rangle = \sum_{q''} \mathcal{B}_{qq''} \langle S_{q''}(t)S_{q'}(t') \rangle + \lambda_q \langle S_{q'}(t') \rangle \quad (53)$$

ayant la même structure que celle des équations décrivant l'évolution des moyennes à un temps $\langle S_q(t) \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle S_q(t) \rangle = \sum_{q''} \mathcal{B}_{qq''} \langle S_{q''}(t) \rangle + \lambda_q \quad (54)$$

C'est un tel résultat qui nous a permis, dans la partie D du chapitre, d'étudier à partir des équations de Bloch optiques la dynamique des fluctuations du dipôle atomique.

d) RELATIONS D'EINSTEIN GÉNÉRALISÉES

Pour terminer ce complément, nous allons montrer que les coefficients de diffusion $D_{qq'}$ introduits dans (40) peuvent être calculés directement à partir des équations de Bloch optiques, sans qu'il soit nécessaire de passer par les expressions (37) des forces de Langevin, comme nous l'avons fait dans le paragraphe 3-b plus haut. Nous suivons pour cela une démarche tout à fait analogue à celle des paragraphes 2-e et 2-f du complément C_{IV}.

Revenons à (38) et appelons « vitesse de dérive de S_q » la quantité

$$\mathcal{D}(S_q) = \sum_{q''} \mathcal{B}_{qq''} S_{q''} + \lambda_q \quad (55)$$

de sorte que la vitesse de variation de S_q donnée par (38) est simplement la somme de la vitesse de dérive et de la force de Langevin.

$$\frac{d}{dt} S_q(t) = \mathcal{D}(S_q(t)) + F_q(t) \quad (56)$$

Notons que $F_q(t)$ étant nul en moyenne, seule la vitesse de dérive subsiste pour $\langle S_q(t) \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle S_q(t) \rangle = \langle \mathcal{D}(S_q(t)) \rangle \quad (57)$$

Considérons maintenant l'opérateur $S_q^+(t)S_{q'}(t)$, qui est un opérateur atomique à l'instant t . L'algèbre des matrices de Pauli permet de l'exprimer en fonction des $S_{q''}(t)$ et de calculer la vitesse de dérive moyenne

$$\frac{d}{dt} \langle S_q^+(t)S_{q'}(t) \rangle = \langle \mathcal{D}(S_q^+(t)S_{q'}(t)) \rangle \quad (58)$$

en fonction des coefficients \mathcal{D} et λ apparaissant dans les équations de Bloch optiques (54).

Par ailleurs, on peut écrire directement, compte tenu de (56) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_q^+(t)S_{q'}(t) \rangle &= \langle \dot{S}_q^+(t)S_{q'}(t) \rangle + \langle S_q^+(t)\dot{S}_{q'}(t) \rangle \\ &= \langle \mathcal{D}(S_q^+(t))S_{q'}(t) \rangle + \langle S_q^+(t)\mathcal{D}(S_{q'}(t)) \rangle + \\ &\quad + \langle F_q^+(t)S_{q'}(t) + S_q^+(t)F_{q'}(t) \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

Pour calculer le dernier terme de (59), il suffit de noter que, d'après (51), les forces $F_q(t)$ ne sont pas corrélées avec les opérateurs $S_{q'}(t - \Delta t)$ si $\Delta t \gg 1/c k_M$. Intégrons donc l'équation (56) entre $t - \Delta t$ et t , de façon à exprimer $S_{q'}(t)$ en fonction de $S_{q'}(t - \Delta t)$ dans le produit $\langle F_q^+(t)S_{q'}(t) \rangle$. Nous choisissons Δt assez petit devant Γ^{-1} pour qu'une approximation linéaire de la variation de $S_q(t)$ entre $t - \Delta t$ et t soit justifiée.

$$S_{q'}(t) = S_{q'}(t - \Delta t) + \Delta t \mathcal{D}(S_{q'}(t - \Delta t)) + \int_{t - \Delta t}^t F_{q'}(t') dt' \quad (60)$$

Lorsqu'on porte cette expression dans le dernier terme de (59), il apparaît, compte tenu de la définition (54) de $\mathcal{D}(S_q)$, des valeurs moyennes du type $\langle F_q^+(t)S_{q'}(t - \Delta t) \rangle$ et $\lambda_{q'}\langle F_q^+(t) \rangle$, qui sont nulles. Il ne reste alors que la contribution du dernier terme de (60).

$$\begin{aligned} \langle F_q^+(t)S_{q'}(t) + S_q^+(t)F_{q'}(t) \rangle &= \\ &= \int_{t - \Delta t}^t dt' \langle F_q^+(t)F_{q'}(t') + F_q^+(t')F_{q'}(t) \rangle \\ &= 2 D_{qq'} \int_{t - \Delta t}^t dt' [g(t - t') + g(t' - t)] \\ &= 2 D_{qq'} \int_{-\Delta t}^{+\Delta t} d\tau g(\tau) = 2 D_{qq'} \end{aligned} \quad (61)$$

Pour établir (61), nous avons utilisé (40) et le fait que l'intégrale de la fonction g sur un intervalle grand devant sa largeur vaut 1.

Le rapprochement de (58), (59) et (61) donne la relation d'Einstein généralisée

$$2 D_{qq'} = \langle \mathcal{D}(S_q^+S_{q'}) - \mathcal{D}(S_q^+)S_{q'} - S_q^+\mathcal{D}(S_{q'}) \rangle \quad (62)$$

où il est entendu que toutes les quantités sont prises à l'instant t .

Comme la relation semblable (76) établie dans le complément C_{IV}, l'équation (62) est l'expression d'un lien entre fluctuations (caractérisées par le coefficient de diffusion $D_{qq'}$) et dissipation (caractérisée par les

coefficients d'amortissement apparaissant dans les vitesses de dérive). Il apparaît aussi clairement sur (62) que le coefficient de diffusion est associé à la partie non hamiltonienne des vitesses de dérive.

On peut enfin vérifier sur l'exemple de D_{++} que le résultat donné par (62) coïncide avec celui trouvé plus haut. Il faut pour cela utiliser les relations

$$S_+^+ S_+ = S_- S_+ = - S_z + \frac{1}{2} \quad (63.a)$$

$$S_z S_\pm = \pm \frac{1}{2} S_\pm \quad (63.b)$$

$$\mathcal{D}(S_+^+ S_+) = \mathcal{D}\left(-S_z + \frac{1}{2}\right) = \Gamma S_z + i \frac{\Omega_1}{2} (S_+ - S_-) + \frac{\Gamma}{2} \quad (63.c)$$

$$\mathcal{D}(S_+) = - \left(i \tilde{\delta}_L + \frac{\Gamma}{2} \right) S_+ - i \Omega_1 S_z \quad (63.d)$$

On obtient ainsi $2 D_{++} = \Gamma$, en accord avec (49.b).

RÉFÉRENCES

Pour l'établissement des équations de Heisenberg couplées de l'atome et du champ et pour la séparation du champ en champ du vide et champ des sources, voir :

- J.R. Ackerhalt and J.H. Eberly, Phys. Rev. **D 10**, 3350 (1974).
- R. Saunders, R.K. Bullough and F. Ahmad, J. Phys. **A 8**, 759 (1975).
- H.J. Kimble and L. Mandel, Phys. Rev. **A 13**, 2123 (1976)
- Allen and Eberly (chapitre 7).

Voir aussi les références du complément C_{IV}.

CHAPITRE VI

La méthode de l'atome habillé

A - INTRODUCTION : L'ATOME HABILLÉ

Ce dernier chapitre est, comme le précédent, consacré à l'étude des manifestations de l'interaction entre un système atomique et un champ laser monochromatique, résonnant ou quasi résonnant. Cependant, au lieu de traiter le champ laser comme un champ extérieur classique, nous le considérons maintenant comme un champ quantique associé à un mode particulier du champ. La motivation d'un tel traitement quantique est double. Tout d'abord, comme l'hamiltonien du système global atome + champ est indépendant du temps, il est possible d'introduire des vrais niveaux d'énergie et d'étudier les manifestations de l'interaction atome-laser sur les positions et les fonctions d'onde de ces niveaux. Ensuite, comme le champ laser est quantifié, il est possible d'identifier clairement les processus élémentaires d'absorption et d'émission induite de photons laser et les processus d'émission spontanée de photons de fluorescence. Nous pourrons ainsi apporter un éclairage nouveau sur plusieurs phénomènes physiques importants comme la répartition spectrale de la lumière émise ou absorbée par l'atome, les corrélations de photons ou les fluctuations des forces dipolaires.

La figure 1 schématisse les divers sous-systèmes considérés dans ce chapitre, leurs hamiltoniens respectifs et les divers couplages. Un atome A , d'hamiltonien H_A , est couplé tout d'abord par l'hamiltonien V_{AL} à un mode particulier du champ, qui contient initialement des photons et que nous appellerons le « mode laser » L , d'hamiltonien H_L . L'atome A est également couplé par V_{AR} au « réservoir » R des modes initialement vides du champ, d'hamiltonien H_R . L'hamiltonien

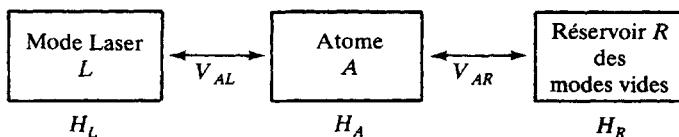


Figure 1. Divers sous-systèmes considérés dans ce chapitre, d'hamiltoniens respectifs H_A , H_L , H_R . Les hamiltoniens V_{AL} et V_{AR} décrivent les interactions entre A et L d'une part, A et R de l'autre.

nien global du système $A + L + R$ est donc

$$H = H_A + H_L + H_R + V_{AL} + V_{AR} \quad (\text{A.1})$$

Dans la partie B ci-dessous, nous commençons par négliger V_{AR} et par considérer le système $A + L$ formé par l'atome et le mode laser en interaction. L'hamiltonien de $A + L$ est :

$$H_{AL} = H_A + H_L + V_{AL} \quad (\text{A.2})$$

Un tel système, que nous appelons « atome habillé par les photons laser », possède une échelle infinie de niveaux d'énergie discrets. Nous étudions en détail les positions et les fonctions d'onde de ces niveaux et montrons comment les processus d'absorption et d'émission stimulée de photons laser se manifestent dans la base des niveaux non couplés (états propres de $H_A + H_L$) et dans la base des niveaux habillés (états propres de H_{AL}).

Nous introduisons ensuite dans la partie C le couplage V_{AR} . Le fait de considérer que c'est le système $A + L$ qui émet spontanément des photons dans le réservoir R des modes vides permet d'introduire l'image de la cascade radiative de l'atome habillé. Dans cette image, la séquence de photons émis par l'atome sous l'effet de l'excitation laser apparaît comme une séquence de photons émis en cascade par l'atome habillé descendant le long de son échelle de niveaux d'énergie. Plusieurs phénomènes physiques sont passés en revue et interprétés dans ce point de vue.

Pour donner un support quantitatif aux images de la partie C, nous étudions dans la partie D l'équation pilote qui décrit l'émission spontanée de l'atome habillé. Utilisant les résultats du chapitre IV, nous établissons l'équation d'évolution de l'opérateur densité σ_{AL} de l'atome habillé sous l'effet de son couplage avec le réservoir R . La projection de cette équation dans la base des niveaux habillés est analysée en détail à la limite séculaire où il est possible de négliger les couplages entre populations des niveaux habillés et cohérences entre niveaux habillés. Nous montrons également que les équations de Bloch optiques sont contenues dans ces équations plus générales.

Les résultats précédents sont enfin appliqués dans la partie E à un certain nombre de problèmes physiques concrets : étude des largeurs et des poids des diverses composantes du triplet de fluorescence ; étude du spectre d'absorption enregistré sur un second faisceau laser qui sonde, soit la transition excitée par le premier faisceau laser, soit une autre transition partageant un niveau commun avec la première ; étude des signaux de correlations de photons ; étude de la valeur moyenne et des fluctuations des forces dipolaires.

Mentionnons pour finir que deux compléments prolongent les discussions de ce chapitre dans d'autres directions. Le complément A_{VI} passe en revue un certain nombre d'applications de la méthode de l'atome habillé dans le domaine des radiofréquences. L'émission spontanée est alors négligeable, mais l'intensité du champ peut être assez importante pour que la fréquence de Rabi soit comparable à la fréquence propre de la transition. Le complément B_{VI} montre comment il est possible d'aborder, dans le point de vue de l'atome habillé, le problème de la redistribution collisionnelle du rayonnement.

B - NIVEAUX D'ÉNERGIE DE L'ATOME HABILLÉ

1. Modélisation du faisceau laser

Pour simplifier au maximum la description quantique du champ laser, nous considérons une cavité *sans pertes*, dont un seul mode, de fréquence ω_L , est excité et contient des photons. Nous associons ainsi au faisceau laser un mode libre d'une cavité, le « mode laser » L . L'atome est supposé placé dans la cavité (Fig. 2.b). Le fait qu'il puisse absorber et émettre de manière stimulée des photons laser représente la seule cause possible de variation du nombre des photons laser.

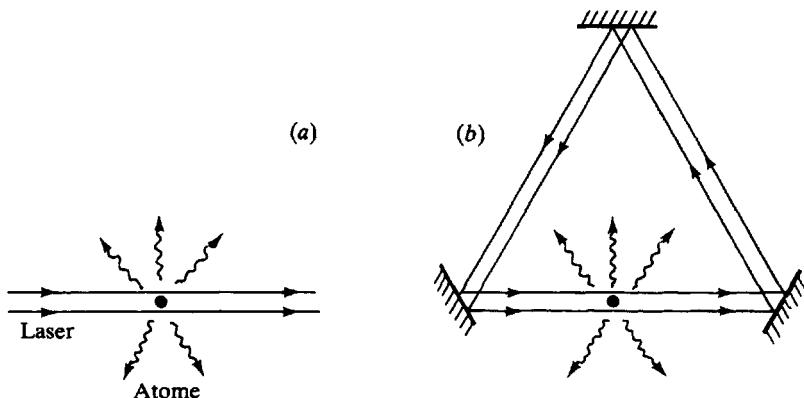


Figure 2 : a - Expérience réelle. L'atome interagit avec une onde laser incidente.
 b - Modélisation utilisée ici. L'atome interagit avec un champ monomode d'une cavité sans pertes.

Dans l'expérience réelle, l'atome n'est pas en général dans une cavité, mais interagit dans l'espace libre avec une onde laser incidente (Fig. 2.a). Pour que la schématisation de la figure 2.b puisse s'appliquer à l'expérience réelle, un certain nombre de conditions doivent être satisfaites.

- (i) Le champ « vu » par l'atome dans la cavité doit avoir la même valeur et les mêmes variations spatiales locales que dans l'expérience réelle.
 - (ii) La cavité doit être suffisamment grande pour ne pas modifier l'émission spontanée de l'atome.
- La condition (i) montre que la valeur exacte du nombre moyen $\langle N \rangle$ de photons dans le mode laser n'a pas d'importance. Seul le

rapport $\langle N \rangle / V$ (où V est le volume de la cavité) est significatif, puisqu'il est relié à la densité d'énergie. Par ailleurs, la condition (ii) impose de prendre V très grand. En fait, nous ferons tendre $\langle N \rangle$ et V vers l'infini en gardant $\langle N \rangle / V$ constant.

Nous supposons également que la largeur ΔN de la distribution du nombre de photons laser est très grande (par exemple, si le mode laser est dans un état cohérent, $\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle}$). Par ailleurs, le nombre de photons émis spontanément par l'atome au cours du temps d'interaction T (correspondant à l'expérience envisagée) est au maximum de l'ordre de $\Gamma T / 2$, et est égal aussi au nombre de photons qui disparaissent du mode laser puisque chaque cycle de fluorescence (absorption-émission spontanée) transfère un photon du mode laser vers les modes initialement vides. Dans la limite $\langle N \rangle \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, on peut prendre aussi $\Delta N \rightarrow \infty$ et donc $\Delta N \gg \Gamma T$, ce qui permet de négliger le nombre de photons laser absorbés devant ΔN et de considérer que, pendant toute la durée T de l'expérience, l'atome est soumis à la même intensité laser.

Remarque

Il est bien sûr possible de considérer aussi des expériences portant sur des atomes situés effectivement dans une cavité de dimensions suffisamment petites pour modifier l'émission spontanée de ces atomes. Il faut alors considérer explicitement les modes de cette cavité réelle. Nous n'abordeons pas ici ces « problèmes d'électrodynamique quantique dans une cavité » (voir les références données à la fin du paragraphe A-1-c du chapitre II).

Dans tout ce qui suit, nous supposerons donc

$$\langle N \rangle, \Delta N \gg 1, \Gamma T \quad (\text{B.1})$$

Nous supposerons aussi que ΔN , tout en étant très grand devant 1, est très petit devant $\langle N \rangle$

$$\langle N \rangle \gg \Delta N \gg 1 \quad (\text{B.2})$$

ce qui revient à prendre pour le nombre de photons dans le mode laser une dispersion, très grande en valeur absolue, mais très faible en valeur relative.

2. Etats non couplés du système atome + photons laser

Commençons par négliger l'interaction entre l'atome et les photons laser. L'hamiltonien du système global est alors $H_L + H_A$ où

$$H_L = \hbar \omega_L \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{B.3})$$

est l'hamiltonien du mode laser, d'opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a , et

$$H_A = \hbar\omega_0 |b\rangle\langle b| \quad (\text{B.4})$$

est l'hamiltonien atomique, ayant pour états propres les états $|b\rangle$ et $|a\rangle$ d'énergies $\hbar\omega_0$ et 0.

Les états propres de $H_A + H_L$ sont donc repérés par deux nombres quantiques : le nombre N de photons laser, le nombre quantique atomique b ou a . Les états $|a, N+1\rangle$ et $|b, N\rangle$ sont proches l'un de l'autre au voisinage de la résonance, c'est-à-dire lorsque

$$|\delta_L| \ll \omega_0 \quad (\text{B.5})$$

où

$$\delta_L = \omega_L - \omega_0 \quad (\text{B.6})$$

est le désaccord entre la fréquence du laser ω_L et la fréquence atomique ω_0 . L'écart entre ces deux niveaux vaut $\hbar\delta_L$, le niveau $|a, N+1\rangle$ étant au-dessus de $|b, N\rangle$ si δ_L est positif. Nous noterons

$$\mathcal{E}(N) = \{ |a, N+1\rangle ; |b, N\rangle \} \quad (\text{B.7})$$

la multiplicité formée par ces deux niveaux. La figure 3 montre une telle multiplicité, située à une distance $\hbar\omega_L$ au-dessous de $\mathcal{E}(N+1)$, formée de $|a, N+2\rangle$ et $|b, N+1\rangle$ et à une distance $\hbar\omega_L$ au-dessus de $\mathcal{E}(N-1)$, formée de $|a, N\rangle$ et $|b, N-1\rangle$

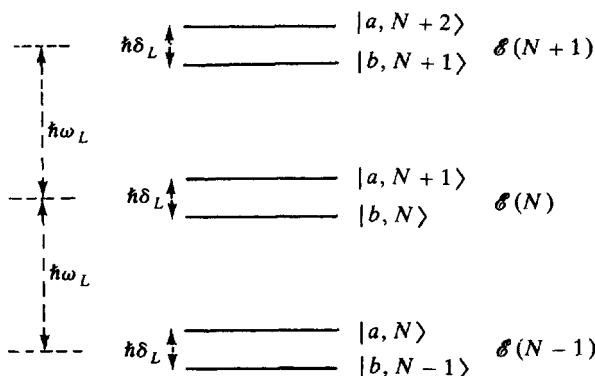


Figure 3. Multiplicités $\mathcal{E}(N+1)$, $\mathcal{E}(N)$, $\mathcal{E}(N-1)$ d'états non couplés du système atome + photons laser. L'écart $\hbar\delta_L$ entre les deux niveaux d'une même multiplicité est très petit devant l'écart $\hbar\omega_L$ entre deux multiplicités adjacentes.

3. Le couplage atome-photons laser

a) HAMILTONIEN D'INTERACTION

Dans le point de vue dipolaire électrique (voir appendice, § 5), l'hamiltonien d'interaction V_{AL} entre l'atome et le mode laser s'écrit $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ où \mathbf{d} est le dipôle atomique et $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ l'opérateur champ laser, évalué à la position \mathbf{R} de l'atome. Avec un choix convenable de l'origine des coordonnées, le champ $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ est égal à :

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_L}{2\varepsilon_0V}} \mathbf{\epsilon}_L(a + a^\dagger) \quad (\text{B.8})$$

où $\mathbf{\epsilon}_L$ est la polarisation du mode laser. Comme

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_{ab}(\mathcal{S}_+ + \mathcal{S}_-) \quad (\text{B.9})$$

où $\mathbf{d}_{ab} = \langle a | \mathbf{d} | b \rangle = \langle b | \mathbf{d} | a \rangle$ est supposé réel et où

$$\mathcal{S}_+ = |b\rangle\langle a| \quad \mathcal{S}_- = |a\rangle\langle b| \quad (\text{B.10})$$

V_{AL} s'écrit finalement

$$V_{AL} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) = g(\mathcal{S}_+ + \mathcal{S}_-)(a + a^\dagger) \quad (\text{B.11})$$

où g est une constante de couplage égale à

$$g = -\mathbf{\epsilon}_L \cdot \mathbf{d}_{ab} \sqrt{\frac{\hbar\omega_L}{2\varepsilon_0V}} \quad (\text{B.12})$$

b) COUPLAGES RÉSONNANTS ET NON RÉSONNANTS

L'hamiltonien d'interaction V_{AL} couple entre eux les deux états de chaque multiplicité $\mathcal{E}(N)$. Nous noterons

$$v_N = \langle b, N | V_{AL} | a, N + 1 \rangle = g \sqrt{N + 1} \quad (\text{B.13})$$

l'élément de matrice correspondant. Physiquement, un tel couplage exprime que l'atome dans l'état $|a\rangle$ peut absorber un photon laser et passer dans l'état $|b\rangle$.

L'état $|a, N + 1\rangle$ est couplé également par V_{AL} à l'état $|b, N + 2\rangle$ qui appartient à $\mathcal{E}(N + 2)$. De même, l'état $|b, N\rangle$ est couplé à $|a, N - 1\rangle$ qui appartient à $\mathcal{E}(N - 2)$. En plus des couplages résonnants à l'intérieur d'une même multiplicité, V_{AL} introduit donc également des couplages non résonnants entre états appartenant à des multiplicités différentes, séparées de $\pm 2\hbar\omega_L$. Nous négligerons ici ces couplages non résonnants. Nous verrons dans le complément A VI (§ 4-b) qu'ils sont à l'origine du déplacement de Bloch-Siegert en résonance magnétique.

c) PÉRIODICITÉ LOCALE DU DIAGRAMME D'ÉNERGIE

La variation relative du couplage v_N sur l'étendue ΔN de la distribution du nombre de photons laser s'écrit, d'après (B.13)

$$\frac{\Delta v_N}{v_N} = \frac{\Delta \sqrt{N+1}}{\sqrt{N+1}} \simeq \frac{1}{2} \frac{\Delta N}{\langle N \rangle} \quad (\text{B.14})$$

Compte tenu de (B.2), une telle variation peut être négligée, ce qui revient à prendre

$$v_N = g \sqrt{\langle N \rangle} \quad (\text{B.15})$$

Le fait de prendre un couplage v_N indépendant de N entraîne que le diagramme des niveaux d'énergie résultant de la diagonalisation de $H_A + H_L + V_{AL}$ pourra être considéré comme périodique sur une plage ΔN de valeurs de N autour de $\langle N \rangle$.

d) INTRODUCTION DE LA FRÉQUENCE DE RABI

Supposons que le mode laser soit dans un état cohérent $|\alpha \exp(-i\omega_L t)\rangle$ (avec α réel). L'équation (B.8) donne alors en valeur moyenne, et compte tenu du fait que $\langle N \rangle = \alpha^2$

$$\langle \alpha e^{-i\omega_L t} | E_\perp(\mathbf{R}) | \alpha e^{-i\omega_L t} \rangle = \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t \quad (\text{B.16.a})$$

$$\mathbf{E}_0 = 2 \epsilon_L \sqrt{\frac{\hbar \omega_L}{2 \epsilon_0 V}} \sqrt{\langle N \rangle} \quad (\text{B.16.b})$$

On sait qu'il est alors correct (voir exercice 17) de traiter le champ laser comme un champ extérieur classique donné par (B.16.a). C'est ce que nous avons fait dans le chapitre V. Nous avions alors posé :

$$\hbar \Omega_1 = - \mathbf{d}_{ab} \cdot \mathbf{E}_0 \quad (\text{B.17})$$

où Ω_1 est la fréquence de Rabi que nous supposerons positive. En reportant (B.16.b) dans (B.17) et en utilisant (B.12), nous pouvons alors écrire (B.15) sous la forme

$$v_N = \hbar \Omega_1 / 2 \quad (\text{B.18})$$

ce qui permet d'exprimer le couplage résonnant associé à V_{AL} en fonction de la fréquence de Rabi Ω_1 introduite au chapitre V.

4. Les états propres de l'atome habillé

a) NIVEAUX D'ÉNERGIE ET FONCTIONS D'ONDE

Lorsqu'on tient compte du couplage v_N entre les deux états $|a, N+1\rangle$ et $|b, N\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ on obtient deux états perturbés que nous

appellerons états habillés et noterons $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$. Pour N variant dans l'intervalle ΔN autour de $\langle N \rangle$, on peut négliger la variation de v_N avec N et utiliser (B.18). On trouve alors que les deux niveaux sont séparés par un intervalle

$$\hbar\Omega = \hbar \sqrt{\delta_L^2 + \Omega_1^2} \quad (\text{B.19})$$

et sont symétriquement disposés par rapport aux niveaux non perturbés (Fig. 4).

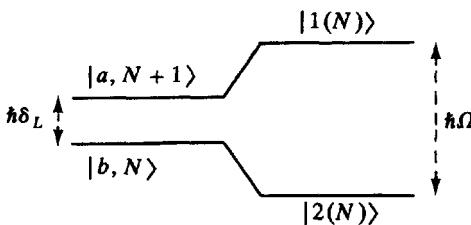


Figure 4. Niveaux non couplés (partie de gauche) et niveaux perturbés (partie de droite) de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$.

Par convention, l'état $|1(N)\rangle$ sera celui de plus grande énergie, de sorte que les états propres $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ s'écrivent :

$$|1(N)\rangle = \sin \theta |a,N+1\rangle + \cos \theta |b,N\rangle \quad (\text{B.20.a})$$

$$|2(N)\rangle = \cos \theta |a,N+1\rangle - \sin \theta |b,N\rangle \quad (\text{B.20.b})$$

où l'angle θ est défini par

$$\cotg 2\theta = -\frac{\delta_L}{\Omega_1} \quad 0 \leq 2\theta < \pi \quad (\text{B.21})$$

b) DIAGRAMME D'ÉNERGIE EN FONCTION DE $\hbar\omega_L$

La figure 5 représente les variations avec $\hbar\omega_L$ des énergies des niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$. Les énergies sont repérées par rapport à l'énergie de l'état non couplé $|a,N\rangle$. Les droites en traits tiretés représentent les énergies des états non couplés $|a,N+1\rangle$ (droite de pente 1 passant par l'origine) et $|b,N\rangle$ (horizontale d'ordonnée $\hbar\omega_0$). Elles se coupent pour $\hbar\omega_L = \hbar\omega_0$. Les énergies des niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ forment les deux branches d'une hyperbole admettant les droites précédentes comme asymptotes. L'écart minimum entre les deux branches de l'hyperbole est réalisé pour $\hbar\omega_L = \hbar\omega_0$ et vaut alors $\hbar\Omega_1$.

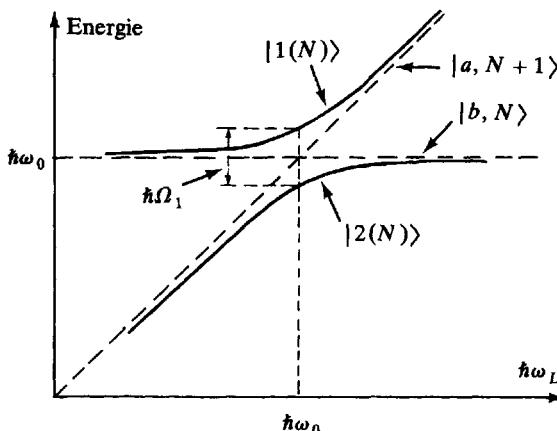


Figure 5. Variations avec $\hbar\omega_L$ des énergies des niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ (en traits pleins). Les droites en traits tiretés représentent les énergies des états non couplés $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$.

A la différence des états non couplés qui se croisent pour $\hbar\omega_L = \hbar\omega_0$, les niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ se repoussent et forment un «anticroisement» (*). L'avantage d'une telle représentation graphique, et d'autres qui seront données dans la suite de ce chapitre, est de donner une vision globale de plusieurs phénomènes physiques. Ainsi, quand on fait varier le désaccord $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ de valeurs positives à des valeurs négatives, on voit sur la figure 5 que l'état $|1(N)\rangle$ passe continûment de l'état non couplé $|a,N+1\rangle$ à l'état non couplé $|b,N\rangle$, en passant pour $\delta_L = 0$ par une superposition linéaire de ces deux états avec des poids égaux. Les écarts entre les niveaux perturbés et leurs asymptotes pour $|\delta_L| \gg \Omega_1$ représentent les déplacements lumineux des états atomiques a et b dus au couplage avec le laser. On voit par exemple sur la figure 5 que le déplacement lumineux de l'état a est positif pour $\delta_L > 0$, et négatif pour $\delta_L < 0$, les conclusions pour l'état b étant inversées.

5. Manifestations physiques des processus d'absorption et d'émission induite

Comme nous l'avons déjà indiqué plus haut, les couplages décrits par v_N correspondent aux processus d'absorption ($|a,N+1\rangle \rightarrow |b,N\rangle$) ou d'émission stimulée ($|b,N\rangle \rightarrow |a,N+1\rangle$). Les manifestations de

(*) Rappelons que nous n'avons pas encore tenu compte de l'émission spontanée. Lorsqu'on tient compte de ce phénomène, les niveaux perturbés continuent à se croiser si Ω_1 n'est pas suffisamment grand devant Γ (voir § C-3-c du chapitre III).

ces processus peuvent être envisagées d'un point de vue dynamique ou statique.

Commençons par le point de vue dynamique. Supposons le système dans l'état $|a,N+1\rangle$ à l'instant $t = 0$. Quelle est la probabilité $\mathcal{P}(t)$ de le trouver dans l'état $|b,N\rangle$ à l'instant t ? Il s'agit là d'un problème bien connu en mécanique quantique. La probabilité $\mathcal{P}(t)$ est une fonction sinusoïdale du temps, oscillant à la fréquence de Bohr Ω associée aux deux niveaux perturbés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$. L'oscillation est complète quand les deux niveaux perturbés contiennent tous deux des proportions égales des états non couplés $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$. On retrouve ainsi le phénomène de « *nutation de Rabi* » qui, à résonance ($\delta_L = 0$), s'effectue à la fréquence de Rabi Ω_1 .

D'un point de vue statique, l'effet du couplage se traduit par le fait que les nouveaux états stationnaires du système global ont des énergies et des fonctions d'onde qui diffèrent de celles des états non couplés. Nous verrons dans la suite que ces différences sont à l'origine de plusieurs phénomènes importants comme par exemple la modification des spectres d'émission ou d'absorption de l'atome lorsqu'il interagit avec le faisceau laser.

C – LA FLUORESCENCE DE RÉSONANCE INTERPRÉTÉE COMME UNE CASCADE RADIATIVE DE L'ATOME HABILLÉ

Après avoir étudié les niveaux d'énergie de l'hamiltonien H_{AL} de l'atome habillé, nous introduisons maintenant le couplage de ce système avec les modes vides du champ (partie de droite de la figure 1). Un tel couplage fait apparaître des photons dans les modes qui étaient initialement vides. Ce sont les photons de *fluorescence* qu'un atome émet dans tout l'espace lorsqu'il est excité par une onde laser résonnante, et qui apparaissent ici comme des photons émis spontanément par l'atome habillé. Le but de cette partie est de préciser cette image physique et de montrer que la fluorescence de résonance peut être effectivement décrite en termes de cascade radiative de l'atome habillé descendant le long de son échelle de niveaux d'énergie par une suite de processus d'émission spontanée. Nous nous contenterons ici d'arguments physiques simples. Une étude plus quantitative sera présentée dans les parties D et E suivantes à partir de l'équation pilote décrivant l'émission spontanée de l'atome habillé. Après un bref rappel des divers temps caractéristiques du problème (§ 1), nous décrivons la cascade radiative de l'atome habillé et les divers phénomènes physiques qui lui sont associés. Deux bases différentes sont utilisées : la base non couplée (§ 2) adaptée à l'aspect temporel des processus, la base des niveaux habillés (§ 3) adaptée à l'aspect énergétique.

1. Les divers temps caractéristiques du problème

Dans le chapitre IV, nous avons introduit deux temps caractéristiques pour un processus de relaxation comme l'émission spontanée : le temps de corrélation τ_c qui est très court (τ_c est inférieur à une période optique $1/\omega_0$ car son inverse caractérise l'échelle de variation de la densité spectrale des fluctuations du vide qui varie en ω^3) ; la durée de vie radiative $\tau_R = \Gamma^{-1}$ qui est beaucoup plus longue et qui est le temps moyen au bout duquel un atome initialement excité émet un photon. Quand un atome est excité, on ne peut pas prédire avec certitude l'instant d'émission du photon (seule la probabilité d'émission par unité de temps $1/\tau_R$ est connue). Quand l'émission se produit, le processus lui-même dure un temps de l'ordre de τ_c .

Considérons maintenant les processus d'absorption et d'émission stimulée. D'après le paragraphe B.5 plus haut, le temps caractéristique qui leur est associé est la période de nutation de Rabi qui vaut Ω_1^{-1} à résonance et Ω^{-1} dans le cas général (voir (B.19)). Dans tout ce chapitre (comme d'ailleurs dans le précédent), nous nous limitons au

cas

$$\tau_c \ll \Omega^{-1} \quad (\text{C.1})$$

La condition (C.1), qui est équivalente à $\omega_0 \gg \Omega_1, |\delta_L|$, exprime que la durée τ_c d'un processus élémentaire d'émission spontanée est trop courte pour que l'interaction avec les photons laser puisse se manifester pendant ce temps τ_c : les photons laser restent « spectateurs ». Par contre, entre deux processus spontanés (échelle de temps Γ^{-1}), l'atome et les photons laser ont le temps de se coupler.

Les images physiques que nous allons donner ci-dessous de la fluorescence de résonance dépendent bien sûr de l'expérience envisagée. Si nous sommes intéressés par l'aspect temporel des phénomènes, en mesurant par exemple au moyen d'un photodétecteur à bande très large les instants d'émission des divers photons émis par l'atome, il est clair que la description de l'évolution du système sera plus simple dans la base non couplée puisque, pour chaque processus élémentaire d'émission spontanée, les photons laser restent spectateurs. Si par contre nous essayons de mesurer l'énergie des photons émis au moyen d'un photodétecteur à bande étroite $\delta\nu$, le temps de mesure (de l'ordre de $\delta\nu^{-1}$) est suffisamment long pour que l'on accède aux fréquences de Bohr du système couplé atome + photons laser. La base des niveaux de l'atome habillé est alors plus intéressante.

2. La cascade radiative dans la base non couplée

a) ÉVOLUTION TEMPORELLE DU SYSTÈME

Sur la figure 6, nous avons représenté trois multiplicités $\mathcal{E}(N)$, $\mathcal{E}(N-1)$, $\mathcal{E}(N-2)$ de niveaux non couplés du système atome + photons laser (les niveaux contenant b étant à droite des niveaux contenant a). Les couplages induits par V_{AL} entre niveaux d'une même multiplicité décrivent les processus d'absorption et d'émission stimulée (flèches horizontales dirigées respectivement vers la droite et vers la gauche). Comme les photons laser restent spectateurs au cours d'un processus élémentaire d'émission spontanée faisant passer l'atome de b à a , les transitions correspondantes relient des états b et a avec la même valeur de N (flèches ondulées).

L'évolution temporelle peut alors être décrite de la manière suivante. Supposons que le système soit initialement dans $\mathcal{E}(N)$ où il effectue une oscillation de Rabi entre $|a, N+1\rangle$ et $|b, N\rangle$. A un certain instant, un « saut quantique » (de durée τ_c) se produit de $|b, N\rangle$ vers $|a, N\rangle$ avec émission spontanée d'un photon. Une nouvelle oscillation de Rabi commence alors entre $|a, N\rangle$ et $|b, N-1\rangle$, jusqu'au prochain saut quantique $|b, N-1\rangle \rightarrow |a, N-1\rangle$, et ainsi de suite...

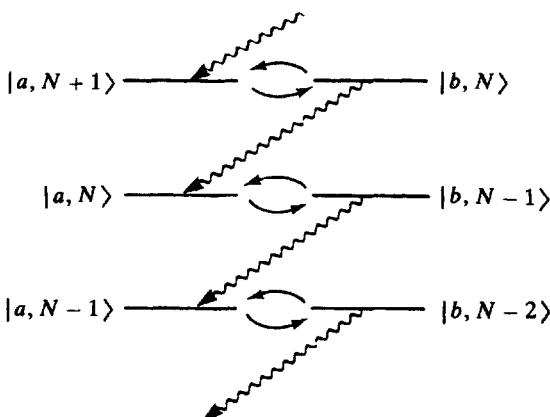


Figure 6. Cascade radiative dans la base non couplée. Les flèches horizontales correspondent aux processus d'absorption et d'émission stimulée, les flèches ondulées obliques aux processus d'émission spontanée.

b) DÉGROUPEMENT DE PHOTONS

La discussion précédente montre que, immédiatement après l'émission spontanée d'un photon, l'atome se trouve dans l'état inférieur a , le système global étant par exemple dans l'état $|a, N\rangle$ de $\mathcal{E}(N-1)$. Aucune transition spontanée ne part de $|a, N\rangle$ (voir Fig. 6) et il faut donc attendre un certain temps pour que l'atome passe dans l'état $|b, N-1\rangle$ (par absorption d'un photon laser) et soit de nouveau capable d'émettre spontanément un autre photon.

Deux émissions spontanées de photons par le même atome sont donc nécessairement séparées par un intervalle de temps τ dont la distribution de probabilité tend vers 0 quand $\tau \rightarrow 0$. Il s'agit là d'un effet de dégroupement de photons qui est typiquement quantique et qui a été observé expérimentalement (*).

c) DÉLAIS ENTRE DEUX ÉMISSIONS SPONTANÉES SUCCESSIVES

Supposons qu'un photon soit émis à l'instant $t = 0$, par exemple au cours d'une transition $|b, N\rangle \rightarrow |a, N\rangle$. À $t = 0$, le système est donc dans l'état $|a, N\rangle$. Comme le photon suivant est nécessairement émis à partir de $|b, N-1\rangle$, la probabilité pour que l'émission suivante ait lieu entre τ et $\tau + d\tau$ est égale à $K(\tau)d\tau$ où $K(\tau)$ est Γ fois la probabilité

(*) H.J. Kimble, M. Dagenais and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. **39**, 691 (1977) ; M. Dagenais and L. Mandel, Phys. Rev. **A18**, 2217 (1978) ; J.D. Cresser, J. Hager, G. Leuchs, M. Rateike and H. Walther in « Dissipative Systems in Quantum Optics », Topics in Current Physics **27**, p. 21, ed. R. Bonifacio (Springer Verlag, 1982).

d'être dans $|b,N-1\rangle$ à l'instant τ sachant qu'on est parti de $|a,N\rangle$ à $t=0$. Pour calculer $K(\tau)$, on peut donc se limiter aux deux seuls états de la multiplicité $\mathcal{O}(N-1)$. Le problème se réduit à celui de l'évolution de deux états couplés, l'un étant stable ($|a,N\rangle$), l'autre instable ($|b,N-1\rangle$). Nous avons déjà étudié un tel problème dans le paragraphe C.3 du chapitre III et montré que l'évolution dans la multiplicité des deux états était décrite par un hamiltonien effectif non hermitique. Il nous faut donc ici résoudre le système d'équations :

$$\begin{aligned} i \dot{c}_a &= \frac{\Omega_1}{2} c_b \\ i \dot{c}_b &= -\delta_L c_b - i \frac{\Gamma}{2} c_b + \frac{\Omega_1}{2} c_a \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

avec la condition initiale $c_a(0) = 1$ $c_b(0) = 0$, et en déduire $K(\tau) = \Gamma |c_b(\tau)|^2$. On trouve ainsi, pour une excitation résonnante ($\delta_L = 0$) :

$$K(\tau) = \Gamma \frac{\Omega_1^2}{\lambda^2} \left(\sin^2 \frac{\lambda \tau}{2} \right) e^{-\Gamma \tau / 2} \quad (\text{C.3.a})$$

$$\text{avec } \lambda^2 = \Omega_1^2 - \frac{\Gamma^2}{4} \quad (\text{C.3.b})$$

(Nous supposons $\lambda^2 > 0$, c'est-à-dire $\Omega_1 \geq \Gamma/2$. Sinon, il faut changer le signe de λ^2 et remplacer sin par sh).

La fonction $K(\tau)$ caractérise la répartition des délais τ entre deux émissions successives. Considérons maintenant la succession des instants aléatoires $t_1, t_2, \dots, t_n, \dots$ où l'atome a émis spontanément des photons au cours de sa cascade radiative. L'instant t_n d'émission du $n^{\text{ème}}$ photon est corrélé avec l'instant t_{n-1} d'émission du photon précédent. C'est l'effet de dégroupement mentionné plus haut. Par contre, les intervalles $\tau_n = t_n - t_{n-1}$ et $\tau_{n-1} = t_{n-1} - t_{n-2}$ sont des variables aléatoires indépendantes puisque, après l'émission d'un photon à l'instant t_{n-1} , le système repart d'un état de type $|a,N\rangle$ indépendamment de tout ce qui s'est passé avant t_{n-1} . La connaissance de la répartition $K(\tau)$ des délais entre deux émissions successives est donc suffisante pour caractériser les propriétés statistiques du processus aléatoire formé par la succession des instants d'émission. Si les photons émis sont observés avec un photodéTECTeur et si l'efficacité η du détecteur est connue, on conçoit aisément qu'il soit possible de calculer, à partir de η et de $K(\tau)$, toutes les caractéristiques du nombre de photons détectés pendant un temps T (signaux de comptage de photons) (*).

Dans le paragraphe E.3, nous calculerons le signal de corrélation de

(*) Voir par exemple, S. Reynaud, Ann. Phys. Fr., 8, 315 (1983).

photons à partir de l'équation pilote de l'atome habillé. Nous justifierons ainsi de manière précise l'introduction de la fonction $K(\tau)$ et toutes les images physiques que nous venons de donner.

3. La cascade radiative dans la base des niveaux habillés

a) TRANSITIONS PERMISES ENTRE NIVEAUX HABILLÉS

Pour trouver les transitions spontanées permises entre niveaux habillés, il faut déterminer les paires de niveaux habillés entre lesquels le dipôle atomique d a un élément de matrice non nul. Nous avons vu dans le paragraphe C.2 précédent que, dans la base non couplée, d ne peut relier que les deux niveaux $|b,N\rangle$ et $|a,N\rangle$ appartenant à deux multiplicités adjacentes $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N-1)$ (flèche en traits tirets de la figure 7). Or, les deux niveaux $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ sont tous les deux « contaminés » par $|b,N\rangle$ (voir (B.20)). De même, les deux niveaux $|1(N-1)\rangle$ et $|2(N-1)\rangle$ de $\mathcal{E}(N-1)$ sont tous deux contaminés par $|a,N\rangle$. On en conclut que les quatre transitions reliant les deux niveaux habillés de deux multiplicités adjacentes sont toutes permises (flèches ondulées de la figure 7). Par contre, comme les deux états $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ ne sont pas contaminés à la fois par $|a,N\rangle$ et $|b,N\rangle$, il n'y a pas de transition permise entre les deux niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ d'une même multiplicité. On montrerait de même qu'il n'y a pas de transitions permises entre $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N-p)$ si $p > 1$.

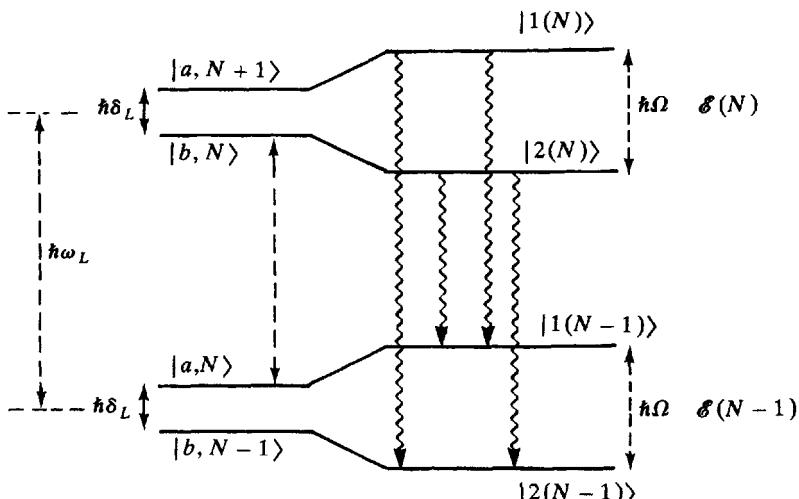


Figure 7. Transitions spontanées permises entre niveaux non couplés (partie de gauche) et niveaux habillés (partie de droite).

Quantitativement, les quatre éléments de matrice de transition entre $|i(N)\rangle$ et $|j(N-1)\rangle$ sont proportionnels aux éléments de matrice $\langle i(N)|\mathcal{S}_+|j(N-1)\rangle$. Pour N variant dans l'intervalle ΔN autour de $\langle N \rangle$, on peut utiliser l'expression (B.20) des états $|i(N)\rangle$. Les éléments de matrice entre $\langle i(N)|$ et $|j(N-1)\rangle$ de l'opérateur \mathcal{S}_+ défini en (B.10) sont alors indépendants de N , et sont notés $(\mathcal{S}_+)_ij$. Ils valent :

$$\langle 1(N)|\mathcal{S}_+|1(N-1)\rangle = (\mathcal{S}_+)_11 = \sin \theta \cos \theta \quad (C.4.a)$$

$$\langle 2(N)|\mathcal{S}_+|2(N-1)\rangle = (\mathcal{S}_+)_22 = -\sin \theta \cos \theta \quad (C.4.b)$$

$$\langle 1(N)|\mathcal{S}_+|2(N-1)\rangle = (\mathcal{S}_+)_12 = \cos^2 \theta \quad (C.4.c)$$

$$\langle 2(N)|\mathcal{S}_+|1(N-1)\rangle = (\mathcal{S}_+)_21 = -\sin^2 \theta \quad (C.4.d)$$

b) TRIPLET DE FLUORESCENCE

Les fréquences centrales des raies émises spontanément dans les transitions permises de la figure 7 valent :

Transition $|1(N)\rangle \rightarrow |2(N-1)\rangle$: Fréquence $\omega_L + \Omega$

Transition $|2(N)\rangle \rightarrow |1(N-1)\rangle$: Fréquence $\omega_L - \Omega$

Transition $|i(N)\rangle \rightarrow |i(N-1)\rangle$: Fréquence ω_L (C.5)
($i = 1, 2$)

Le point de vue de l'atome habillé permet ainsi de comprendre très simplement la structure en triplet du spectre de la lumière de fluorescence, formé d'une raie centrale en ω_L et de deux bandes latérales en $\omega_L \pm \Omega$.

Pour déterminer les largeurs de ces trois raies, il ne suffit pas de calculer la largeur naturelle de chaque niveau habillé, qui est égale à la probabilité par unité de temps d'émission spontanée d'un photon à partir de ce niveau (donnée par la règle d'or de Fermi). En effet, comme le diagramme des niveaux de l'atome habillé est périodique, des transferts de cohérence peuvent se produire (comme pour l'oscillateur harmonique ; voir complément B_{IV} , § 3.b) entre paires de niveaux correspondant à la même fréquence de Bohr. Nous verrons plus loin comment la résolution de l'équation pilote de l'atome habillé permet de résoudre ce problème. Nous obtiendrons également pour les poids des raies des expressions simples en termes de populations des niveaux de départ et de taux de transition.

c) CORRÉLATIONS TEMPORELLES ENTRE PHOTONS DE FLUORESCENCE FILTRÉS EN FRÉQUENCE

Supposons $\Omega \gg \Gamma$. Les trois raies du triplet, dont nous verrons plus loin qu'elles ont une largeur de l'ordre de Γ , sont alors bien séparées.

En interposant devant le détecteur à bande large qui observe la lumière de fluorescence un filtre en fréquence de largeur $\delta\omega$ telle que

$$\Gamma \ll \delta\omega \ll \Omega \quad (\text{C.6})$$

et dont la fréquence centrale coïncide avec ω_L , $\omega_L + \Omega$ ou $\omega_L - \Omega$, on peut déterminer dans quelle raie du triplet le photon détecté a été émis tout en conservant une résolution temporelle meilleure que Γ^{-1} .

Pour interpréter les signaux observés dans de telles conditions, l'image de la cascade radiative entre niveaux habillés est particulièrement commode. Par exemple, dans la cascade représentée sur la figure 8, le système partant de $|1(N)\rangle$ émet un photon $\omega_L + \Omega$, ce qui l'amène en $|2(N-1)\rangle$, puis un photon $\omega_L - \Omega$, ce qui l'amène en $|1(N-2)\rangle$, puis un photon ω_L , ce qui l'amène en $|1(N-3)\rangle \dots$

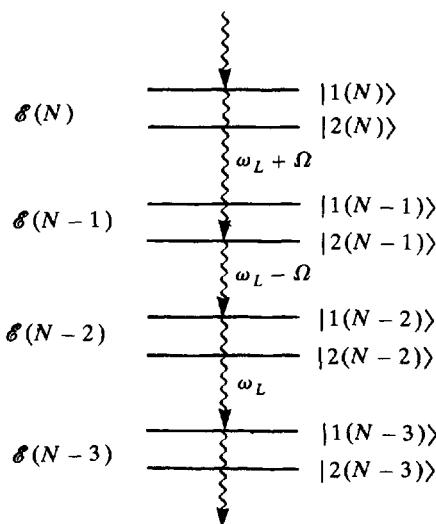


Figure 8. Cascade radiative dans la base des niveaux habillés.

L'image précédente permet de comprendre simplement les corrélations temporelles entre photons émis dans les diverses raies du triplet. Ainsi, après émission d'un « grand » photon ($\omega_L + \Omega$), l'atome habillé est dans un niveau de type 2 à partir duquel il ne peut émettre qu'un « petit » photon ($\omega_L - \Omega$) ou un « moyen » (ω_L). Entre deux émissions de grands photons ($\omega_L + \Omega$), il doit donc y avoir nécessairement émission d'un petit ($\omega_L - \Omega$), ce qui ramène l'atome habillé d'un niveau de type 2 à un niveau de type 1. Les corrélations entre photons $\omega_L + \Omega$ et $\omega_L - \Omega$ ont pu être observées expérimentalement (*).

(*) A. Aspect, G. Roger, S. Reynaud, J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, Phys. Rev. Lett. 45, 617 (1980).

Remarque

Revenons à l'effet de dégroupement de photons observable avec un détecteur à bande large (voir § C.2.b plus haut). Comment apparaît-il dans la base des niveaux habillés ? Immédiatement après la détection d'un photon par un détecteur à bande large, on sait que le système est dans un état ne contenant que a , par exemple $|a,N\rangle$. Or, l'état $|a,N\rangle$ est une superposition linéaire des deux niveaux habillés $|1(N-1)\rangle$ et $|2(N-1)\rangle$ qui ne rayonne pas. L'évolution ultérieure fait varier la différence de phase entre $|1(N-1)\rangle$ et $|2(N-1)\rangle$ à la vitesse Ω et rend possible à nouveau l'émission de lumière. En d'autres termes, les oscillations de Rabi observées sur la population de $|b,N\rangle$, et donc sur le taux d'émission, apparaissent dans la base habillée comme un signal de battements quantiques, la cohérence initiale entre les deux niveaux de $\mathcal{E}(N-1)$ étant préparée percussionnellement par la détection du premier photon. En mettant devant le détecteur des filtres du type de ceux envisagés dans ce paragraphe, on supprime ces battements de la même manière que, dans une expérience de battements quantiques, toute tentative de déterminer à partir de quel niveau le photon est émis supprime l'effet d'interférence qui est à l'origine du battement.

D - ÉQUATION PILOTE DE L'ATOME HABILLÉ

Dans le paragraphe E-1-a du chapitre IV, nous avons établi l'équation pilote qui décrit l'émission spontanée d'un atome à deux niveaux a et b . Pour la discussion de cette partie D, il est utile de rappeler cette équation et de l'écrire sous forme opératorielle

$$\frac{d}{dt} \sigma_A = -\frac{i}{\hbar} [H_A, \sigma_A] - \frac{\Gamma}{2} (\mathcal{S}_+ \mathcal{S}_- \sigma_A + \sigma_A \mathcal{S}_+ \mathcal{S}_-) + \Gamma \mathcal{S}_- \sigma_A \mathcal{S}_+$$

(D.1)

Dans (D.1), σ_A est l'opérateur densité atomique, H_A l'hamiltonien atomique (B.4), \mathcal{S}_+ et \mathcal{S}_- les opérateurs donnés plus haut en (B.10). La projection de (D.1) sur la base $\{ |a\rangle, |b\rangle \}$ donne

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_{bb} &= -\Gamma \sigma_{bb} \\ \dot{\sigma}_{aa} &= \Gamma \sigma_{bb} \\ \dot{\sigma}_{ab} &= i \omega_0 \sigma_{ab} - \frac{\Gamma}{2} \sigma_{ab}\end{aligned}\quad (D.2)$$

qui sont bien les équations (E.5) et (E.6) du chapitre IV (nous supposons les déplacements radiatifs réinclus dans ω_0).

Dans cette partie D, nous généralisons l'équation (D.1) pour le système atome + mode laser, c'est-à-dire pour l'atome habillé d'hamiltonien $H_{AL} = H_A + H_L + V_{AL}$. Nous commençons (§ 1) par établir la forme générale de l'équation pilote dans le cadre de l'approximation des vitesses de variation indépendantes. Nous projetons ensuite cette équation sur la base des niveaux habillés et interprétons physiquement les résultats obtenus à la limite séculaire $\Omega \gg \Gamma$ (§ 2). Nous montrons enfin qu'un état quasi stationnaire peut être défini pour la cascade radiative de l'atome habillé (§ 3).

1. Forme générale de l'équation pilote

a) APPROXIMATION DES VITESSES DE VARIATION INDÉPENDANTES

La discussion physique du paragraphe C-1 ci-dessus montre que, si la condition $\tau_c \ll \Omega^{-1}$ est vérifiée, les photons laser restent « spectateurs » au cours d'un processus élémentaire d'émission spontanée, car l'oscillation de Rabi de fréquence Ω n'a pas le temps de s'effectuer pendant le temps de corrélation τ_c d'un tel processus. Par contre, entre deux processus d'émission spontanée, le couplage V_{AL} entre l'atome et les photons laser a le temps de se manifester. L'approximation des vitesses de variation indépendantes consiste à ajouter indépendamment les

vitesses de variation de l'opérateur densité σ_{AL} de l'atome habillé, dues respectivement aux processus d'absorption et d'émission induite d'une part, d'émission spontanée d'autre part, et calculées comme si chaque type de processus agissait seul. Nous généralisons ainsi l'équation (D.1) sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{AL} = & -\frac{i}{\hbar} [H_{AL}, \sigma_{AL}] - \\ & -\frac{\Gamma}{2} (\mathcal{S}_+ \mathcal{S}_- \sigma_{AL} + \sigma_{AL} \mathcal{S}_+ \mathcal{S}_-) + \Gamma \mathcal{S}_- \sigma_{AL} \mathcal{S}_+ \end{aligned} \quad (D.3)$$

Il convient de noter la présence de H_{AL} (qui contient V_{AL}) dans le premier terme, au lieu de $H_A^{(*)}$. Nous reviendrons plus loin (voir remarque du paragraphe D-2-b et complément B_{VI}) sur les corrections qui peuvent être apportées à l'approximation des vitesses de variation indépendantes.

Les deux derniers termes de (D.3) décrivent l'effet de l'émission spontanée. Par projection sur la base non couplée des états propres de $H_A + H_L$, ils donnent

$$\begin{aligned} \langle b, N | \dot{\sigma}_{AL} | b, N' \rangle &= -\Gamma \langle b, N | \sigma_{AL} | b, N' \rangle \\ \langle a, N | \dot{\sigma}_{AL} | a, N' \rangle &= \Gamma \langle b, N | \sigma_{AL} | b, N' \rangle \\ \langle b, N | \dot{\sigma}_{AL} | a, N' \rangle &= -\frac{\Gamma}{2} \langle b, N | \sigma_{AL} | a, N' \rangle \end{aligned} \quad (D.4)$$

On retrouve bien les mêmes équations que pour σ_A tout seul (voir (D.2)), les nombres quantiques N et N' des photons laser n'étant pas changés lors du processus.

A partir de maintenant, et pour simplifier les notations, nous écrirons σ l'opérateur densité de l'atome habillé au lieu de σ_{AL} .

b) COMPARAISON AVEC LES ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES

Posons

$$\begin{aligned} \langle S_+ \rangle &= \sum_N \langle a, N | \sigma | b, N \rangle \\ \langle S_- \rangle &= \sum_N \langle b, N | \sigma | a, N \rangle \\ \langle S_z \rangle &= \frac{1}{2} \sum_N [\langle b, N | \sigma | b, N \rangle - \langle a, N | \sigma | a, N \rangle] \end{aligned} \quad (D.5)$$

Les équation du mouvement de $\langle S_+ \rangle$, $\langle S_- \rangle$, $\langle S_z \rangle$ peuvent être obtenues à partir de (D.3). On peut vérifier aisément que ces équations

(*) Les opérateurs \mathcal{S}_\pm de (D.3) doivent être aussi compris comme les produits tensoriels des opérateurs (B.10) par l'opérateur unité du mode laser.

coïncident exactement avec les équations de Bloch optiques (A.18) du chapitre V. Pour les termes d'émission spontanée, un tel résultat n'est pas surprenant, compte tenu de la similarité entre (D.2) et (D.4). Pour les termes d'absorption et d'émission induite (contribution du premier terme de (D.3)), il suffit de noter que la restriction de H_{AL} dans une multiplicité $\mathcal{E}(N)$ de l'atome habillé est représentée, à un terme constant près, dans la base $\{|b,N\rangle, |a,N+1\rangle\}$ par la matrice

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\delta_L & \Omega_1 \\ \Omega_1 & \delta_L \end{pmatrix} \quad (\text{D.6})$$

Or, nous avons introduit dans le chapitre V une représentation géométrique de l'oscillation de Rabi (associée aux processus d'absorption et d'émission induite) en termes de spin fictif couplé à des champs magnétiques (voir paragraphe A-4 du chapitre V). Il est facile de voir que la matrice (D.6) coïncide avec celle qui représente, dans le référentiel tournant $0XYZ$, l'hamiltonien d'interaction du spin fictif avec le champ efficace \mathbf{B}_e (voir figure 1 du chapitre V). Il existe donc une analogie étroite entre les niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ d'une multiplicité $\mathcal{E}(N)$ de l'atome habillé et les états propres du spin fictif le long de la direction du champ efficace \mathbf{B}_e . L'angle 2θ introduit en (B.21) correspond d'ailleurs à l'angle entre les deux champs \mathbf{B}_e et \mathbf{b}_0 de la figure 1 du chapitre V.

Nous avons ainsi montré que les équations de Bloch optiques du chapitre V sont contenues dans les équations plus générales (D.3). Il ne faut pas perdre de vue cependant que l'opération de « réduction » associée à (D.5) (sommation sur N) « condense » toutes les multiplicités $\mathcal{E}(N)$ en une seule, et fait donc perdre l'image de la cascade radiative $\mathcal{E}(N) \rightarrow \mathcal{E}(N-1) \rightarrow \mathcal{E}(N-2) \dots$ et toutes les interprétations physiques simples qui en découlent (voir partie précédente C).

2. Equation pilote dans la base des niveaux habillés à la limite séculaire

a) AVANTAGES DE LA BASE COUPLÉE À LA LIMITÉ SÉCULAIRE

L'équation opératorielle (D.3) peut être projetée sur n'importe quelle base. La base des niveaux habillés est particulièrement commode pour le premier terme de (D.3) puisqu'elle diagonalise H_{AL} . Par contre, les deux derniers termes de (D.3) donnent dans cette base des équations moins simples que (D.4). Apparaissent en particulier des couplages entre les populations des niveaux habillés et les cohérences entre deux niveaux.

La situation se simplifie cependant si l'écart $\hbar\Omega$ entre les deux niveaux d'une multiplicité est grand devant $\hbar\Gamma$. On peut en effet

négliger alors les couplages « non séculaires » entre populations et cohérences et retrouver des images physiques simples en termes de taux de transfert par émission spontanée entre niveaux habillés. Dans toute la suite de cette partie nous supposerons donc

$$\Omega \gg \Gamma \quad (\text{D.7})$$

b) ÉVOLUTION DES POPULATIONS

Projetons l'équation (D.3) sur $|i(N)\rangle$ à droite, $\langle i(N)|$ à gauche (avec $i = 1$ ou 2). En négligeant les couplages non-séculaires entre populations et cohérences, nous obtenons pour la population

$$\pi_{i(N)} = \langle i(N) | \sigma | i(N) \rangle \quad (\text{D.8})$$

du niveau habillé $|i(N)\rangle$ l'équation d'évolution

$$\dot{\pi}_{i(N)} = - \left(\sum_{j=1,2} \Gamma_{i \rightarrow j} \right) \pi_{i(N)} + \sum_{l=1,2} \Gamma_{l \rightarrow i} \pi_{l(N+1)} \quad (\text{D.9})$$

où les taux de transition

$$\Gamma_{i \rightarrow j} = \Gamma |\langle i(N) | \mathcal{S}_+ | j(N-1) \rangle|^2 = \Gamma |(\mathcal{S}_+)_ij|^2 \quad (\text{D.10})$$

valent, compte tenu de (C.4)

$$\begin{aligned} \Gamma_{1 \rightarrow 1} &= \Gamma_{2 \rightarrow 2} = \Gamma \cos^2 \theta \sin^2 \theta \\ \Gamma_{2 \rightarrow 1} &= \Gamma \sin^4 \theta \\ \Gamma_{1 \rightarrow 2} &= \Gamma \cos^4 \theta \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

L'interprétation de l'équation (D.9), écrite pour $i = 1$

$$\dot{\pi}_{1(N)} = -\pi_{1(N)}(\Gamma_{1 \rightarrow 1} + \Gamma_{1 \rightarrow 2}) + \pi_{2(N+1)}\Gamma_{2 \rightarrow 1} + \pi_{1(N+1)}\Gamma_{1 \rightarrow 1} \quad (\text{D.12})$$

est très claire (voir Fig. 9.a). Le niveau $|1(N)\rangle$ se désexcite par émission spontanée vers les niveaux $|1(N-1)\rangle$ (avec un taux $\Gamma_{1 \rightarrow 1}$) et $|2(N-1)\rangle$ (avec un taux $\Gamma_{1 \rightarrow 2}$) et est alimenté à partir des niveaux $|1(N+1)\rangle$ (avec un taux $\Gamma_{1 \rightarrow 1}$) et $|2(N+1)\rangle$ (avec un taux $\Gamma_{2 \rightarrow 1}$).

Remarque

Au lieu de déduire (D.9) de (D.3), on pourrait utiliser les équations générales (C.7) et (C.5) du chapitre IV. Les expressions (D.11) des taux de transition ne seraient alors retrouvées que si la densité spectrale des fluctuations du vide (qui varie en ω^3) peut être considérée comme constante d'une composante à l'autre du triplet de fluorescence, c'est-à-dire si

$$\omega_L^3 = (\omega_L - \Omega)^3 = (\omega_L + \Omega)^3 = \omega_0^3 \quad (\text{D.13})$$

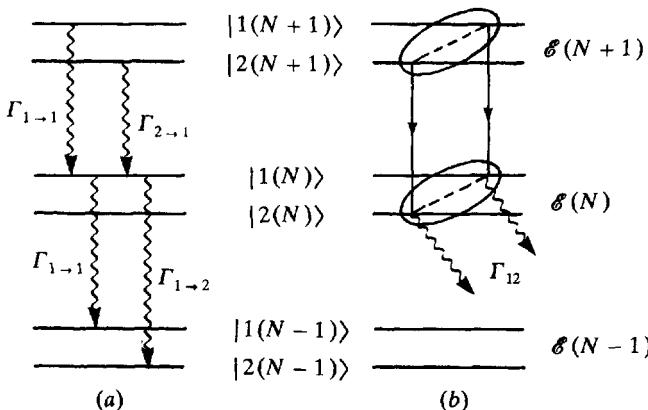


Figure 9 : a - Transferts de populations responsables de la variation de la population du niveau $|1(N)\rangle$
b - Transfert de cohérence de $\mathcal{E}(N+1)$ vers $\mathcal{E}(N)$.

La condition (D.13) n'est autre que la condition de validité (C.1) de l'approximation des vitesses de variation indépendantes (puisque $\tau_c \leq \omega_0^{-1}$). On voit ainsi qu'en utilisant directement les résultats généraux du chapitre IV, on pourrait corriger l'approximation précédente et obtenir une équation pilote pour l'émission spontanée de l'atome habillé, plus générale que celle déduite de (D.1) et (D.3).

c) ÉVOLUTION DES COHÉRENCES - TRANSFERTS DE COHÉRENCE

La projection de (D.3) à droite sur $|2(N)\rangle$, à gauche sur $|1(N)\rangle$ donne

$$\frac{d}{dt} \langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle = -i\Omega \langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle - \\ - \Gamma_{12} \langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle + K_{12} \langle 1(N+1) | \sigma | 2(N+1) \rangle \quad (\text{D.14})$$

où

$$K_{12} = \frac{1}{2} [\Gamma_{1\rightarrow 1} + \Gamma_{1\rightarrow 2} + \Gamma_{2\rightarrow 1} + \Gamma_{2\rightarrow 2}] = \frac{\Gamma}{2} \quad (\text{D.15})$$

est la demi-somme de l'ensemble des taux de transition hors des niveaux $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ et où

$$K_{12} = \Gamma \langle 1(N) | \mathcal{S}_- | 1(N+1) \rangle \langle 2(N+1) | \mathcal{S}_+ | 2(N) \rangle \\ = \Gamma (\mathcal{S}_+)^*_{11} (\mathcal{S}_+)^{12} = -\Gamma \sin^2 \theta \cos^2 \theta \quad (\text{D.16})$$

Le premier terme du second membre de (D.14) décrit l'évolution propre de la cohérence $\langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle$ à la fréquence Ω . Le second

décrit l'amortissement dû aux transitions radiatives des deux niveaux concernés vers les niveaux inférieurs de $\mathcal{E}(N - 1)$. Le dernier terme décrit enfin un transfert radiatif de cohérence de $\mathcal{E}(N + 1)$ vers $\mathcal{E}(N)$ (voir Fig. 9.b). Comme pour l'oscillateur harmonique (voir complément B_{IV} , § 3-b), il est dû à la périodicité du diagramme d'énergie qui donne naissance à des cohérences de même fréquence.

Remarque

Il est possible également de considérer des cohérences entre niveaux appartenant à des multiplicités différentes (avec $|N - N'| \ll \Delta N$). Par exemple, on obtient pour l'équation d'évolution de $\langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle$ l'expression

$$\frac{d}{dt} \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle = -i[\Omega + (N - N')\omega_L] \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle - \Gamma'_{12} \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle + K'_{12} \langle 1(N+1) | \sigma | 2(N'+1) \rangle \quad (\text{D.17})$$

où Γ'_{12} , qui est la demi somme des taux de transition de $|1(N)\rangle$ vers $|1(N-1)\rangle$ et $|2(N-1)\rangle$ et de $|2(N')\rangle$ vers $|1(N'-1)\rangle$ et $|2(N'-1)\rangle$, est égal à Γ_{12} et où

$$\begin{aligned} K'_{12} &= \Gamma \langle 1(N) | \mathcal{S}_- | 1(N+1) \rangle \langle 2(N'+1) | \mathcal{S}_+ | 2(N') \rangle \\ &= \Gamma (\mathcal{S}_+)^*_{11} (\mathcal{S}_+)^*_{22} = K_{12} \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

On en déduit que, au terme d'évolution propre près, les cohérences $\langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle$ et $\langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle$ obéissent aux mêmes équations d'évolution. Une démarche analogue permettrait de montrer que les cohérences $\langle i(N) | \sigma | i(N') \rangle$ avec $i = 1, 2$ obéissent, au terme d'évolution propre près, aux mêmes équations que les populations $\langle i(N) | \sigma | i(N) \rangle = \pi_{i(N)}$.

d) POPULATIONS RÉDUITES ET COHÉRENCES RÉDUITES

Les équations d'évolution des grandeurs « réduites »

$$\pi_i = \sum_N \pi_{i(N)} \quad (\text{D.19.a})$$

$$\sigma_{12} = \sum_N \langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle \quad (\text{D.19.b})$$

se déduisent aisément des équations (D.9) et (D.14).

Pour les populations réduites π_1 et π_2 , on obtient

$$\dot{\pi}_1 = -\pi_1 \Gamma_{1 \rightarrow 2} + \pi_2 \Gamma_{2 \rightarrow 1} \quad (\text{D.20})$$

$$\dot{\pi}_2 = -\pi_2 \Gamma_{2 \rightarrow 1} + \pi_1 \Gamma_{1 \rightarrow 2}$$

La solution stationnaire de ces équations

$$\pi_1^{st} = \frac{\Gamma_{2 \rightarrow 1}}{\Gamma_{1 \rightarrow 2} + \Gamma_{2 \rightarrow 1}} = \frac{\sin^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} \quad (\text{D.21.a})$$

$$\pi_2^{st} = \frac{\Gamma_{1 \rightarrow 2}}{\Gamma_{1 \rightarrow 2} + \Gamma_{2 \rightarrow 1}} = \frac{\cos^4 \theta}{\sin^4 \theta + \cos^4 \theta} \quad (\text{D.21.b})$$

obéit à l'équation

$$\pi_1^{st} \Gamma_{1 \rightarrow 2} = \pi_2^{st} \Gamma_{2 \rightarrow 1} \quad (\text{D.22})$$

dite de « bilan détaillé » et bien sûr à la condition de normalisation

$$\pi_1^{st} + \pi_2^{st} = 1 \quad (\text{D.23})$$

Quant au régime transitoire, il s'écrit

$$\pi_i(\tau) = \pi_i^{st} + [\pi_i(0) - \pi_i^{st}] e^{-\tau/\tau_{pop}} \quad (\text{D.24})$$

où la constante de temps τ_{pop} est l'inverse de

$$\Gamma_{pop} = \Gamma_{1 \rightarrow 2} + \Gamma_{2 \rightarrow 1} = \Gamma(\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) \quad (\text{D.25})$$

La cohérence réduite σ_{12} obéit à l'équation d'évolution

$$\dot{\sigma}_{12} = -(i \Omega + \Gamma_{coh}) \sigma_{12} \quad (\text{D.26})$$

où le taux d'amortissement Γ_{coh} vaut

$$\Gamma_{coh} = \Gamma_{12} - K_{12} = \Gamma \left(\frac{1}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \theta \right) \quad (\text{D.27})$$

(on a utilisé (D.15) et (D.16)). Il convient de noter l'importance du terme de transfert ($-K_{12}$) qui entraîne que Γ_{coh} ne se réduit pas simplement à $\Gamma_{12} = \Gamma/2$.

Remarque

Nous avons vu plus haut (§ D.1-b) que l'opération de réduction (D.5) dans la base non couplée redonnait les équations de Bloch optiques habituelles. Nous faisons ici en (D.19) une réduction dans la base des niveaux habillés. On peut montrer que les équations obtenues (D.20) et (D.26) coïncident exactement avec les équations de Bloch optiques, moyennant les deux transformations suivantes.

Les équations de Bloch doivent être écrites, non dans la base $\{ | \pm \rangle \}$ des états propres de S_z , mais dans la base des états propres du spin fictif le long du champ efficace B_e (Fig. 1 du chapitre V). Un tel changement de base revient à diagonaliser la partie hamiltonienne des équations de Bloch optiques.

Dans cette nouvelle base, les termes de relaxation dus à l'émission

spontanée sont moins simples que dans la base $\{ | \pm \rangle \}$. Pour retrouver (D.20) et (D.26), il faut ne garder que les termes de relaxation séculaires (dans la nouvelle base).

Comme plus haut, il ne faut pas perdre de vue que la réduction (D.19) fait perdre l'image de la cascade radiative dans la base des niveaux habillés (voir Fig. 8).

Plus généralement, on peut considérer les cohérences réduites

$$\sigma_{ij}^{(q)} = \sum_N \langle i(N - q) | \sigma | j(N) \rangle \quad (\text{D.28})$$

faisant intervenir des cohérences entre niveaux appartenant à des multiplicités différentes, séparées de $q\hbar\omega_L$. Les équations (D.17), (D.18) et (D.27) entraînent alors que

$$\dot{\sigma}_{12}^{(q)} = [i(q\omega_L - \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \sigma_{12}^{(q)} \quad (\text{D.29})$$

Au terme d'évolution propre près, les cohérences réduites $\sigma_{12}^{(q)}$ et σ_{12} définie en (D.19.b) obéissent aux mêmes équations d'évolution. On montrerait de même que $\sigma_{21}^{(q)}$ obéit à l'équation d'évolution

$$\dot{\sigma}_{21}^{(q)} = [i(q\omega_L + \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \sigma_{21}^{(q)} \quad (\text{D.30})$$

et que les deux cohérences réduites $\sigma_{ii}^{(q)}$ avec $i = 1, 2$ obéissent aux équations couplées

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{11}^{(q)} &= iq\omega_L \sigma_{11}^{(q)} - \sigma_{11}^{(q)} \Gamma_{1 \rightarrow 2} + \sigma_{22}^{(q)} \Gamma_{2 \rightarrow 1} \\ \dot{\sigma}_{22}^{(q)} &= iq\omega_L \sigma_{22}^{(q)} - \sigma_{22}^{(q)} \Gamma_{2 \rightarrow 1} + \sigma_{11}^{(q)} \Gamma_{1 \rightarrow 2} \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

tout à fait analogues aux équations d'évolution (D.20) des populations réduites.

3. Etat quasi stationnaire pour la cascade radiative

a) MATRICE DENSITÉ INITIALE

A l'instant initial $t = 0$, l'atome dans l'état $|a\rangle$ est mis en présence du mode laser dans l'état σ_L , de sorte que l'opérateur densité du système global est

$$\sigma(0) = |a\rangle \langle a| \otimes \sigma_L \quad (\text{D.32})$$

Supposons que l'état σ_L soit un état cohérent $|\alpha\rangle \langle \alpha|$ avec

$$|\alpha\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} c_N |N\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\alpha^2/2} \frac{\alpha^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle \quad (\text{D.33})$$

(nous avons supposé α réel). La distribution initiale $p_0(N)$ du nombre de photons laser

$$p_0(N) = \langle N | \sigma_L | N \rangle = c_N^2 = e^{-\alpha^2} \frac{\alpha^{2N}}{N!} \quad (\text{D.34})$$

est alors centrée en $\langle N \rangle = \alpha^2$ et a pour largeur $\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle}$ satisfaisant à (B.2). A partir de (D.32), (D.34) et (B.20), on peut calculer toutes les valeurs initiales des éléments de matrice de σ . Par exemple

$$\begin{aligned} \langle 1(N) | \sigma(0) | 2(N') \rangle &= \sin \theta \cos \theta c_{N+1} c_{N'+1} \\ &= \sin \theta \cos \theta \sqrt{p_0(N+1)p_0(N'+1)} \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

Si l'on considère des cohérences entre multiplicités voisines ($|N - N'| \ll \Delta N$), le radical de (D.35) peut être approximé par $p_0(N)$, de sorte que $\langle 1(N) | \sigma(0) | 2(N') \rangle$ est voisin de $\langle 1(N) | \sigma(0) | 2(N) \rangle$. Plus généralement, pour $|N - N'|$ petit, on a

$$\langle i(N) | \sigma(0) | j(N') \rangle \approx \langle i(N) | \sigma(0) | j(N) \rangle \quad (\text{D.36})$$

b) RÉGIME TRANSITOIRE ET ÉTAT QUASI STATIONNAIRE

Soit $\sigma_N(t)$ la restriction de $\sigma(t)$ dans la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ des deux états $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$. D'après ce qui précède, l'évolution de $\sigma_N(t)$ doit refléter l'existence de deux phénomènes. Tout d'abord, on doit retrouver l'évolution transitoire de la matrice densité réduite introduite au paragraphe D-2-d : les populations et cohérences réduites doivent tendre vers leurs valeurs stationnaires π_1^{st} , π_2^{st} (données en (D.21)) et $\sigma_{12}^{st} = 0$ avec des constantes de temps Γ_{pop}^{-1} et Γ_{coh}^{-1} de l'ordre de Γ^{-1} . Ensuite, comme des photons laser sont absorbés en permanence, la distribution $p(N)$ du nombre de photons laser doit se déplacer vers le bas. Pendant un temps T , l'ordre de grandeur de ce déplacement est ΓT .

Dès que $\Gamma T \gg 1$, la matrice densité réduite a atteint son état stationnaire. Comme $\langle N \rangle$ et ΔN sont très grands devant ΓT (condition (B.1)), on peut négliger le déplacement vers le bas de la distribution $p_0(N)$ et considérer un état quasi stationnaire pour la cascade dans lequel

$$\pi_{i(N)} \approx \pi_i^{st} p_0(N) \quad (\text{D.37})$$

$$\langle 1(N) | \sigma | 2(N) \rangle \approx \sigma_{12}^{st} p_0(N) = 0 \quad (\text{D.38})$$

Remarques

- (i) Un tel état quasi stationnaire peut être considéré comme résultant d'un équilibre dynamique. Revenons à la figure 9.a. Quand N varie de

± 1 , $p_0(N)$ varie très peu et (D.37) entraîne que $\pi_{i(N+1)} = \pi_{i(N)}$. L'annulation de $\dot{\pi}_{1(N)}$ dans l'état quasi stationnaire résulte tout d'abord du fait que ce qui arrive de $|1(N+1)\rangle$ est compensé par ce qui part vers $|1(N-1)\rangle$. Ensuite, la condition de bilan détaillé (D.22) pour π_1^s et π_2^s entraîne, compte tenu de (D.37), que ce qui arrive de $|2(N+1)\rangle$ est compensé par ce qui part vers $|2(N-1)\rangle$. Le niveau $|1(N)\rangle$ est donc traversé par des flux de populations qui s'équilibrivent à zéro.

(ii) Nous n'avons considéré ici que l'état quasi stationnaire de $\langle i(N) | \sigma | j(N) \rangle$. Pour obtenir celui de $\langle i(N) | \sigma | j(N') \rangle$, il suffit de noter que les deux éléments de matrice obéissent aux mêmes équations d'évolution, au terme d'évolution propre près (voir remarque, § D-2-c), et que leurs valeurs initiales sont identiques (voir (D.36)). Dans le régime quasi stationnaire leurs valeurs ne diffèrent donc que par l'exponentielle d'évolution libre. En particulier

$$\langle i(N) | \sigma | i(N') \rangle = e^{-i(N-N')\omega_L t} \pi_i^s p_0(N) \quad (\text{D.39})$$

$$\langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle = e^{-i(N-N')\omega_L t} \sigma_{12}^s p_0(N) = 0 \quad (\text{D.40})$$

E - ÉTUDE DE QUELQUES APPLICATIONS

1. Largeurs et poids des diverses composantes du triplet de fluorescence

Comme première application de la méthode de l'atome habillé, nous déterminons les largeurs et les poids des trois composantes du triplet de fluorescence émis par l'atome. Nous repartons pour cela de l'expression du spectre en régime stationnaire (voir formules (D.8) et (A.15) du chapitre V)

$$\begin{aligned}\mathcal{I}(\omega) &= \frac{\Gamma}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathcal{S}_+(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle e^{-i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{\Gamma}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \langle \mathcal{S}_+(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle e^{-i\omega\tau} d\tau\end{aligned}\quad (\text{E.1})$$

La moyenne est prise ici dans l'état quasistationnaire défini plus haut (§ D-3). La normalisation de $\mathcal{I}(\omega)$ a été choisie de façon que l'intensité totale

$$I = \int d\omega \mathcal{I}(\omega) = \Gamma \langle \mathcal{S}_+(0) \mathcal{S}_-(0) \rangle = \Gamma \sigma_{bb} \quad (\text{E.2})$$

correspond au nombre de photons émis par seconde.

Pour évaluer la moyenne à deux temps qui figure dans la deuxième ligne de (E.1), nous utilisons le théorème de régression quantique qui dit que, pour $\tau > 0$, $\langle \mathcal{S}_+(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle$ évolue comme $\langle \mathcal{S}_+(\tau) \rangle$. Il nous faut donc commencer par étudier l'évolution de $\langle \mathcal{S}_+(\tau) \rangle$, c'est-à-dire encore celle du dipôle moyen.

a) ÉVOLUTION DU DIPÔLE MOYEN

Dans la base des niveaux habillés, l'opérateur \mathcal{S}_+ s'écrit, avec les notations introduites en (C.4)

$$\mathcal{S}_+ = \sum_{i,j,N} (\mathcal{S}_+)^{ij} |i(N)\rangle \langle j(N-1)| \quad (\text{E.3})$$

c'est-à-dire encore

$$\mathcal{S}_+ = \mathcal{S}_+^{12} + \mathcal{S}_+^{21} + \sum_{i=1,2} \mathcal{S}_+^{ii} \quad (\text{E.4})$$

avec

$$\mathcal{S}_+^{ij} = (\mathcal{S}_+)^{ij} \sum_N |i(N)\rangle \langle j(N-1)| \quad (\text{E.5})$$

L'intérêt de la décomposition (E.4) est que les trois termes du second

membre contribuent au dipôle moyen avec des fréquences propres différentes.

Commençons par exemple par calculer la valeur moyenne de \mathcal{S}_+^{12} . Il vient

$$\langle \mathcal{S}_+^{12} \rangle = (\mathcal{S}_+)_ {12} \sum_N \langle 2(N-1) | \sigma | 1(N) \rangle = (\mathcal{S}_+)_ {12} \sigma_{21}^{(1)} \quad (\text{E.6})$$

où $\sigma_{21}^{(1)}$ est une cohérence réduite du type de celles introduites plus haut en (D.28) et dont l'équation d'évolution est, d'après (D.30), donné par

$$\dot{\sigma}_{21}^{(1)} = [i(\omega_L + \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \sigma_{21}^{(1)} \quad (\text{E.7})$$

L'utilisation de (E.7) dans (E.6) montre alors que

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \rangle = [i(\omega_L + \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \rangle \quad (\text{E.8})$$

La composante $\langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \rangle$ du dipôle moyen évolue donc à la fréquence $\omega_L + \Omega$ et est amortie avec un taux égal à Γ_{coh} . Un calcul analogue donne pour $\langle \mathcal{S}_+^{21}(\tau) \rangle$

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathcal{S}_+^{21}(\tau) \rangle = [i(\omega_L - \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \langle \mathcal{S}_+^{21}(\tau) \rangle \quad (\text{E.9})$$

Considérons maintenant la valeur moyenne des opérateurs \mathcal{S}_+^{ii} apparaissant dans le dernier terme de (E.4)

$$\langle \mathcal{S}_+^{ii} \rangle = (\mathcal{S}_+)_ {ii} \sum_N \langle i(N-1) | \sigma | i(N) \rangle = (\mathcal{S}_+)_ {ii} \sigma_{ii}^{(1)} \quad (\text{E.10})$$

En utilisant les équations d'évolution (D.31) des cohérences réduites $\sigma_{ii}^{(1)}$ et le fait que, d'après (C.4.a) et (C.4.b) $(\mathcal{S}_+)_ {11} = -(\mathcal{S}_+)_ {22}$, on obtient pour les valeurs moyennes $\langle \mathcal{S}_+^{11}(\tau) \rangle$ et $\langle \mathcal{S}_+^{22}(\tau) \rangle$ les équations d'évolution couplées

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_+^{11}(\tau) \rangle &= (i\omega_L - \Gamma_{1 \rightarrow 2}) \langle \mathcal{S}_+^{11}(\tau) \rangle - \Gamma_{2 \rightarrow 1} \langle \mathcal{S}_+^{22}(\tau) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_+^{22}(\tau) \rangle &= -\Gamma_{1 \rightarrow 2} \langle \mathcal{S}_+^{11}(\tau) \rangle + (i\omega_L - \Gamma_{2 \rightarrow 1}) \langle \mathcal{S}_+^{22}(\tau) \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

La matrice 2×2 associée à un tel système linéaire a pour valeurs propres $i\omega_L$ et $i\omega_L - \Gamma_{\text{pop}}$ où Γ_{pop} est donné en (D.25). On en déduit que, après un régime transitoire, amorti avec un taux Γ_{pop} , les valeurs moyennes $\langle \mathcal{S}_+^{ii}(\tau) \rangle$ tendent vers un régime stationnaire (ou plus exactement d'oscillation forcée) donné, d'après (E.10) et (D.39) par

$$\langle \mathcal{S}_+^{ii}(\tau) \rangle_{st} = (\mathcal{S}_+)_ {ii} \pi_i^{st} e^{i\omega_L t} \quad (\text{E.12})$$

b) LARGEURS ET INTENSITÉS DES RAIES LATÉRALES

Considérons maintenant la contribution de chacun des termes de (E.4) au spectre (E.1). Le premier, $\langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \rangle$, donne naissance à la moyenne à deux temps $\langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle$. Le théorème de régression quantique indique que, pour $\tau > 0$, cette moyenne à deux temps obéit à une équation d'évolution identique à celle de la moyenne à un temps $\langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \rangle$. L'utilisation de (E.8) donne alors pour $\tau > 0$:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle = [i(\omega_L + \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle \quad (\text{E.13})$$

équation dont la solution est

$$\langle \mathcal{S}_+^{12}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle = \langle \mathcal{S}_+^{12} \mathcal{S}_- \rangle \exp[i(\omega_L + \Omega) - \Gamma_{\text{coh}}] \tau \quad (\text{E.14})$$

Le report de (E.14) dans (E.1) donne

$$\Gamma \langle \mathcal{S}_+^{12} \mathcal{S}_- \rangle \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\text{coh}}}{(\omega - \omega_L - \Omega)^2 + \Gamma_{\text{coh}}^2} \quad (\text{E.15})$$

c'est-à-dire une raie lorentzienne centrée en $\omega_L + \Omega$, de largeur totale à mi-hauteur $2 \Gamma_{\text{coh}}$ et de poids (*) $\Gamma \langle \mathcal{S}_+^{12} \mathcal{S}_- \rangle$ égal d'après (E.5) à

$$\begin{aligned} \Gamma \langle \mathcal{S}_+^{12} \mathcal{S}_- \rangle &= \Gamma \langle \mathcal{S}_+ \rangle_{12} \text{Tr} \sum_N (|1(N)\rangle \langle 2(N-1)| \mathcal{S}_- \sigma) \\ &= \Gamma \langle \mathcal{S}_+ \rangle_{12} \sum_{i,N} (\mathcal{S}_-)_{2i} \langle i(N) | \sigma | 1(N) \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Or, d'après (D.38), $\langle 2(N) | \sigma | 1(N) \rangle$ est nul dans le régime quasi stationnaire. On en déduit, compte tenu de (D.37) et (D.10)

$$\Gamma \langle \mathcal{S}_+^{12} \mathcal{S}_- \rangle = \Gamma |(\mathcal{S}_+)_ {12}|^2 \pi_1^s \sum_N p_0(N) = \pi_1^s \Gamma_{1 \rightarrow 2} \quad (\text{E.17})$$

L'interprétation physique d'un tel résultat est très claire. La raie $\omega_L + \Omega$ est émise dans une transition $|1(N)\rangle \rightarrow |2(N-1)\rangle$ (voir (C.5)). Le poids de la raie est le produit de la population des niveaux de départ $|1(N)\rangle$ par le taux $\Gamma_{1 \rightarrow 2}$ des transitions $|1(N)\rangle \rightarrow |2(N-1)\rangle$.

Un calcul tout à fait analogue donnerait pour l'autre raie latérale en $\omega_L - \Omega$ une lorentzienne centrée en $\omega_L - \Omega$, de largeur totale à mi-hauteur $2 \Gamma_{\text{coh}}$ et de poids

$$\Gamma \langle \mathcal{S}_+^{21} \mathcal{S}_- \rangle = \pi_2^s \Gamma_{2 \rightarrow 1} \quad (\text{E.18})$$

(*) Compte tenu de (E.2) et (E.15), le poids d'une raie du triplet est le nombre de photons émis par seconde dans cette raie.

Ce poids est égal à celui de l'autre raie latérale donné par (E.17), d'après la condition de bilan détaillé (D.22). Comme les deux raies latérales ont même poids et même largeur, le spectre de fluorescence est symétrique par rapport à ω_L .

c) STRUCTURE DE LA RAIE CENTRALE

Le dernier terme de (E.4) donne naissance à la somme des deux moyennes à deux temps $\langle \mathcal{S}_+^{ii}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle$, avec $i = 1, 2$. Pour $\tau > 0$, ces deux moyennes à deux temps obéissent, d'après le théorème de régression quantique, à des équations d'évolution couplées

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathcal{S}_+^{ii}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle = \sum_j \beta_{ij} \langle \mathcal{S}_+^{jj}(\tau) \mathcal{S}_-(0) \rangle \quad (\text{E.19})$$

faisant intervenir les mêmes coefficients que les équations d'évolution (E.11) relatives aux moyennes à un temps $\langle \mathcal{S}_+^{ii}(\tau) \rangle$. Comme les valeurs propres de la matrice β_{ij} sont égales à $i\omega_L$ et $i\omega_L - \Gamma_{\text{pop}}$, on en déduit que la contribution du dernier terme de (E.4) est de la forme générale

$$\langle [\mathcal{S}_+^{11}(\tau) + \mathcal{S}_+^{22}(\tau)] \mathcal{S}_-(0) \rangle = A \exp[i\omega_L - \Gamma_{\text{pop}}]\tau + B \exp i\omega_L \tau \quad (\text{E.20})$$

Le dernier terme de (E.20), reporté dans (E.1), donne naissance à la composante cohérente (ou élastique) du spectre de fluorescence

$$\mathcal{I}_{\text{coh}}(\omega) = \Gamma B \delta(\omega - \omega_L) \quad (\text{E.21})$$

de poids ΓB . Quant au premier terme, il fait apparaître la composante centrale inélastique du triplet de fluorescence, centrée en ω_L , de poids ΓA et de largeur totale à mi-hauteur $2\Gamma_{\text{pop}}$.

Pour calculer A et B , faisons tout d'abord $\tau = 0$ dans (E.20). Il vient

$$A + B = \langle \mathcal{S}_+^{11} \mathcal{S}_- \rangle + \langle \mathcal{S}_+^{22} \mathcal{S}_- \rangle \quad (\text{E.22})$$

Un calcul analogue à celui conduisant de (E.16) à (E.17) donne alors pour le poids total $\Gamma(A + B)$ des deux raies centrées en ω_L le résultat

$$\Gamma(A + B) = \pi_1^{\text{st}} \Gamma_{1-1} + \pi_2^{\text{st}} \Gamma_{2-2} \quad (\text{E.23})$$

L'interprétation de (E.23) est analogue à celle donnée plus haut pour (E.16). Faisons enfin $\tau \gg \Gamma_{\text{pop}}^{-1}$ dans (E.20). Le premier terme du second membre de (E.20) est alors nul et les deux opérateurs du premier sont décorrélés de sorte que

$$\begin{aligned} B \exp(i\omega_L \tau) &= \langle \mathcal{S}_+^{11}(\tau) + \mathcal{S}_+^{22}(\tau) \rangle_{\text{st}} \langle \mathcal{S}_+(0) \rangle_{\text{st}}^* \\ &= [(\mathcal{S}_+)_1 \pi_1^{\text{st}} + (\mathcal{S}_+)_2 \pi_2^{\text{st}}] e^{i\omega_L \tau} \langle \mathcal{S}_+(0) \rangle_{\text{st}}^* \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

d'après (E.12). Or, d'après (E.8) et (E.9), seul le dernier terme de (E.4) contribue à $\langle \mathcal{S}_+(0) \rangle_{st}^*$ qui est donc égal au complexe conjugué du terme entre crochets de (E.24). On en déduit, en utilisant le fait que $(\mathcal{S}_+)_{{22}} = -(\mathcal{S}_+)_{{11}}$, le poids ΓB de la raie cohérente

$$I_{coh} = \Gamma B = \Gamma |(\mathcal{S}_+)_{{11}}|^2 (\pi_1^{st} - \pi_2^{st})^2 = \Gamma_{1 \rightarrow 1} (\pi_1^{st} - \pi_2^{st})^2 \quad (E.25)$$

Finalement, la méthode de l'atome habillé nous a permis d'obtenir des expressions analytiques pour toutes les caractéristiques (largeurs et poids) des raies du spectre de fluorescence, dans la limite séculaire $\Omega \gg \Gamma$ où ces raies sont bien séparées. En utilisant les expressions (D.25) et (D.27) de Γ_{pop} et Γ_{coh} , ainsi que la définition (B.21) de θ , on peut retrouver tous les résultats obtenus dans le paragraphe D-3-c du chapitre V pour les largeurs des raies du spectre dans les deux limites $\Omega_1 \gg \Gamma$, $\omega_L = \omega_0$ d'une part, $|\delta_L| \gg \Omega_1, \Gamma$ d'autre part. Nous obtenons ici en plus des expressions très physiques pour les poids des raies (voir (E.17), (E.18) et (E.23)) en termes de populations de niveaux habillés et de taux d'émission spontanée.

2. Spectre d'absorption d'un second faisceau laser sonde

a) PROBLÈME PHYSIQUE CONSIDÉRÉ

En plus du faisceau laser à ω_L , en général intense, qui perturbe l'atome sur la transition $a \leftrightarrow b$ de fréquence ω_0 , nous considérons maintenant un second faisceau laser, d'intensité très faible, et dont la fréquence ω est voisine, soit de ω_0 (Fig. 10.α), soit de la fréquence ω'_0 d'une autre transition $b \leftrightarrow c$ partageant un niveau commun (b) avec la précédente (Fig. 10.β).

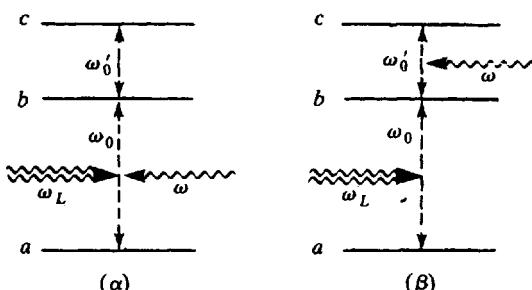


Figure 10. Le second faisceau laser, de fréquence ω , sonde, soit la transition $a \leftrightarrow b$ déjà perturbée par le premier laser de fréquence ω_L (Fig. α), soit la transition $b \leftrightarrow c$ (Fig. β).

L'absorption du faisceau laser sonde est mesurée au moyen d'un détecteur. Nous nous proposons d'étudier ci-dessous la modification du spectre d'absorption du faisceau sonde due à la présence du faisceau de fréquence ω_L .

b) CAS OÙ LES DEUX LASERS EXCITENT LA MÊME TRANSITION

Comme le second faisceau laser est très peu intense, nous négligeons toute perturbation introduite par ce faisceau sur les positions, largeurs et populations quasi stationnaires des niveaux de l'atome « habillé par les photons ω_L ». La figure 11 représente les multiplicités $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N-1)$ de cet atome habillé. Les ronds schématisent les populations $\pi_1^{st} p_0(N)$ et $\pi_2^{st} p_0(N)$ des niveaux de type 1 et 2 dans le régime quasi stationnaire. Nous avons supposé $\delta_L < 0$ ($\omega_L < \omega_0$), de sorte que le niveau $|1(N)\rangle$, qui est plus contaminé par $|b,N\rangle$ que $|2(N)\rangle$, est plus instable et donc moins peuplé ($\pi_1^{st} < \pi_2^{st}$).

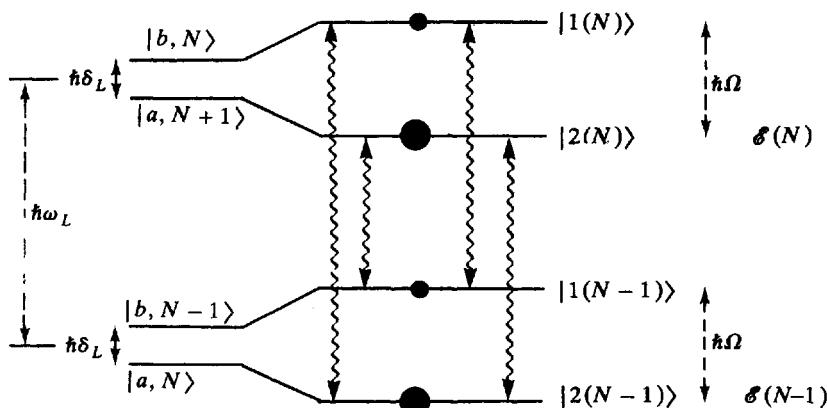


Figure 11. Niveaux habillés et populations quasi stationnaires du système atome + photons ω_L . Les flèches ondulées indiquent les transitions qui sont sondées par le second faisceau laser.

Les transitions qui sont « sondées » par le second faisceau laser correspondent aux paires de niveaux habillés entre lesquels le dipôle atomique \mathbf{d} a un élément de matrice non nul. Ce sont donc les mêmes que celles qui interviennent dans le triplet de fluorescence, et elles sont représentées par des flèches ondulées sur la figure 11. Sans entrer dans le détail des calculs (très analogues en fait à ceux du paragraphe E-1 précédent), on comprend alors tout de suite que la transition $|1(N)\rangle \leftrightarrow |2(N-1)\rangle$ (de fréquence $\omega_L + \Omega$) est absorbante puisque, le niveau inférieur étant plus peuplé que le niveau supérieur, les processus d'absorption $|2(N-1)\rangle \rightarrow |1(N)\rangle$ l'emportent sur les proces-

sus d'émission induite $|1(N)\rangle \rightarrow |2(N-1)\rangle$. Ces conclusions sont inversées pour la transition $|2(N)\rangle \leftrightarrow |1(N-1)\rangle$ (de fréquence $\omega_L - \Omega$) qui est amplifiante puisque le niveau supérieur est plus peuplé que le niveau inférieur. Enfin, les deux transitions $|i(N)\rangle \rightarrow |i(N-1)\rangle$ avec $i = 1,2$ (de fréquence ω_L) ne conduisent à aucune amplification ni aucune absorption puisqu'elles relient des niveaux également peuplés (*).

La méthode de l'atome habillé permet ainsi de prévoir très simplement que pour $\omega_L < \omega_0$ et à la limite séculaire ($\Omega \gg \Gamma$), le spectre d'absorption du faisceau sonde sur la transition $a \leftrightarrow b$ se compose d'une raie d'absorption, centrée en $\omega_L + \Omega$, de largeur $2\Gamma_{coh}$ (taux d'amortissement des cohérences réduites σ_{12}), et de poids $\Gamma_{1 \rightarrow 2}(\pi_2^{st} - \pi_1^{st})$, et d'une raie amplifiante, centrée en $\omega_L - \Omega$, de largeur $2\Gamma_{coh}$ et de poids $\Gamma_{2 \rightarrow 1}(\pi_2^{st} - \pi_1^{st})$ (**).

Remarques

(i) Les résultats précédents peuvent être interprétés perturbativement à la limite $\omega_0 - \omega_L \gg \Omega_1, \Gamma$. Les niveaux $|1(N)\rangle$ et $|2(N-1)\rangle$ diffèrent alors très peu de $|b,N\rangle$ et $|a,N\rangle$, de sorte que la raie d'absorption $|2(N-1)\rangle \rightarrow |1(N)\rangle$, dont la fréquence est très proche de ω_0 , correspond à l'absorption ordinaire $a \rightarrow b$ (à l'ordre 0 en $\Omega_1/(\omega_0 - \omega_L)$). Par contre, la transition $|2(N)\rangle \rightarrow |1(N-1)\rangle$, dont la fréquence est très voisine de $2\omega_L - \omega_0$, fait intervenir la contamination de $|2(N)\rangle$ par $|b,N\rangle$ et celle de $|1(N-1)\rangle$ par $|a,N\rangle$. Cette transition est donc au moins d'ordre 2 en $\Omega_1/(\omega_0 - \omega_L)$. Le mécanisme d'amplification est lié à un processus à trois photons : passage de l'atome de a à b par absorption de deux photons laser ω_L et émission stimulée d'un photon $2\omega_L - \omega_0$ (voir figure 28 du chapitre II).

(ii) Les résultats mentionnés ci-dessus ne sont évidemment valables que pour un ensemble d'atomes immobiles. Lorsque l'on tient compte de la distribution des vitesses, de nouveaux effets apparaissent puisque, pour chaque classe de vitesse, les faisceaux habillant et sonde voient leur fréquence déplacée par effet Doppler. La situation où ces deux faisceaux ont même fréquence et se propagent en sens opposés (géométrie de la spectroscopie d'absorption saturée) est étudiée dans l'exercice 20 à la limite $ku \gg \Omega_1 \gg \Gamma$ (ku étant la largeur Doppler de la transition). On montre notamment dans cet exercice que, même lorsque $\omega = \omega_L = \omega_0$, le milieu n'est pas totalement transparent pour le faisceau sonde.

(*) Ces résultats ne sont valables que dans le cadre de l'approximation séculaire. Les termes non séculaires donnent naissance à des processus d'amplification ou d'atténuation pour $|\omega_L - \omega| \sim \Gamma$. Leur importance est toutefois plus faible, par un facteur Γ/Ω_1 . Pour plus de détails, voir : B.R. Mollow, Phys. Rev. A 5, 2217 (1972) ; G. Grynpberg, E. Le Bihan et M. Pinard, J. Physique, 47, 1321 (1986) ; M.T. Gruneisen, K.R. MacDonald and R.W. Boyd, J.O.S.A. B 5, 123 (1988).

(**) Ces effets ont été observés expérimentalement. Voir par exemple F.Y. Wu, S. Ezekiel, M. Ducloy and B.R. Mollow, Phys. Rev. Lett. 38, 1077 (1977).

c) CAS OÙ LES DEUX LASERS EXCITENT DEUX TRANSITIONS PARTAGEANT UN NIVEAU COMMUN - EFFET AUTLER-TOWNES

Nous considérons maintenant la situation de la figure 10.β et supposons ω_0 et ω'_0 suffisamment différents pour qu'on puisse négliger toute perturbation produite par le laser intense de fréquence $\omega_L \sim \omega_0$ sur le niveau c (le laser ω_L est trop loin de résonance pour la transition $b \leftrightarrow c$).

Sur la partie gauche de la figure 12, nous avons représenté les niveaux non couplés $|a,N+1\rangle$, $|b,N\rangle$ et $|c,N\rangle$. Comme ω_L est proche de ω_0 , les niveaux $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$ sont proches et séparés de $\hbar|\delta_L|$ (nous supposons $\omega_L < \omega_0$ de sorte que $|b,N\rangle$ est au-dessus de $|a,N+1\rangle$). La distance entre $|b,N\rangle$ et $|c,N\rangle$ est $\hbar\omega'_0$. Sous l'effet du couplage V_{AL} , les niveaux $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$ donnent naissance aux deux niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ séparés par $\hbar\Omega$: par contre, $|c,N\rangle$ qui n'est pas proche des niveaux $|b,N \pm 1\rangle$ auxquels il est couplé reste inchangé (*) (partie de droite de la figure 12).

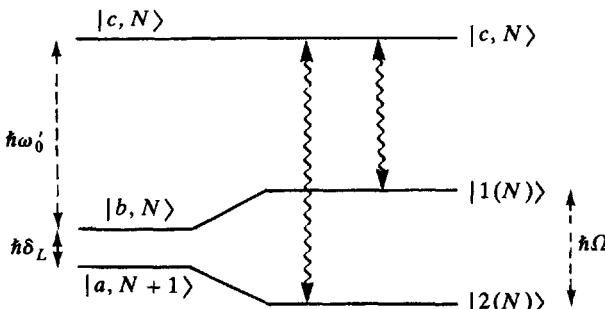


Figure 12. Niveaux non couplés (partie de gauche) et niveaux habillés (partie de droite) permettant d'interpréter le doublet Autler-Townes (flèches ondulées).

Les transitions, de fréquences voisines de ω'_0 , qui sont sondées par le second faisceau laser, sont celles qui se réduisent à la transition $|c,N\rangle \leftrightarrow |b,N\rangle$ à la limite $\Omega_1 = 0$. Comme les deux niveaux habillés $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ sont tous deux contaminés par $|b,N\rangle$, on voit apparaître, pour $\Omega_1 \neq 0$, deux transitions : $|c,N\rangle \leftrightarrow |1(N)\rangle$ de fréquence $\omega'_0 - (\Omega + \delta_L)/2$ et $|c,N\rangle \leftrightarrow |2(N)\rangle$ de fréquence $\omega'_0 + (\Omega - \delta_L)/2$ représentées par les flèches ondulées de la figure 12.

Ainsi, la méthode de l'atome habillé permet de prévoir simplement que l'excitation par un laser intense d'une transition $a \leftrightarrow b$ dédouble la

(*) Ces couplages non résonants introduisent en fait un léger déplacement lumineux de l'état $|c,N\rangle$ que nous négligerons ici.

raie d'absorption d'un second faisceau laser sonde sur une autre transition $b \leftrightarrow c$ partageant un niveau commun avec $a \leftrightarrow b$. Le doublet correspondant est appelé « doublet Autler-Townes » (*). Si, Ω_1 étant fixé, on fait varier $\omega_L - \omega_0$, l'écart entre les deux composantes du doublet varie et passe par une valeur minimale égale à Ω_1 pour $\omega_L = \omega_0$. Si le niveau $|c,N\rangle$ est non peuplé en l'absence du faisceau sonde, le poids de chaque composante $|i(N)\rangle \leftrightarrow |c,N\rangle$ du doublet Autler-Townes est proportionnel au produit de la population stationnaire π_i^s du niveau $|i(N)\rangle$ (donnée en (D.21)) par le taux de transition de $|i(N)\rangle$ vers $|c,N\rangle$ proportionnel à $|\langle i(N)|b,N\rangle|^2$. La largeur de la raie $|i(N)\rangle \leftrightarrow |c,N\rangle$ est la somme de la largeur du niveau c et de celle du niveau $|i(N)\rangle$ égale à $\sum_j \Gamma_{i \rightarrow j}$.

Remarque

Comme dans le paragraphe E-2-b précédent, il est possible de donner une interprétation perturbative des deux raies à la limite $\omega_0 - \omega_L \gg \Omega_1, \Gamma$. Le niveau $|1(N)\rangle$ diffère alors très peu de $|b,N\rangle$ et la raie $|1(N)\rangle \rightarrow |c,N\rangle$, de fréquence très proche de ω'_0 , correspond à l'absorption ordinaire (d'ordre 0 en $\Omega_1/(\omega_0 - \omega_L)$) entre le niveau b et le niveau c (Fig. 13.α). La transition $|2(N)\rangle \rightarrow |c,N\rangle$, de fréquence voisine de $\omega'_0 + \omega_0 - \omega_L$, fait intervenir la contamination de $|2(N)\rangle$ par $|b,N\rangle$. Elle est donc au moins d'ordre 1 en $\Omega_1/(\omega_0 - \omega_L)$. Elle correspond au processus d'absorption à deux photons de la figure 13.β où l'atome passe de a à c en absorbant un photon laser ω_L et un photon du laser sonde.

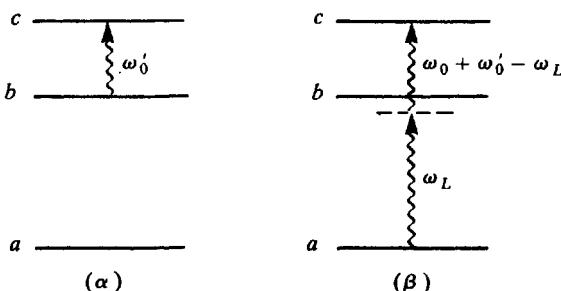


Figure 13 : Interprétation perturbative du doublet Autler-Townes à la limite $\omega_0 - \omega_L \gg \Omega_1, \delta_L$.
 α - Processus direct à un photon sonde entre b et c .
 β - Processus à deux photons (un photon laser et un photon sonde) entre a et c .

(*) S.H. Autler and C.H. Townes, Phys. Rev. 100, 703 (1955). Voir aussi C.H. Townes and A.L. Schawlow, Microwave Spectroscopy, Dover, 1975 § 10-9.

3. Corrélations de photons

Dans la partie D du chapitre V, nous avons introduit la moyenne à deux temps

$$\langle \mathcal{S}_+(t)\mathcal{S}_+(t+\tau)\mathcal{S}_-(t+\tau)\mathcal{S}_-(t) \rangle \quad (\text{E.26})$$

qui intervient dans la densité de probabilité de détecter, sur la lumière émise par l'atome, deux photons séparés par l'intervalle τ (voir la formule (D.27) du chapitre V qui, en régime stationnaire, ne dépend que de τ). Nous allons calculer ici un tel signal de corrélation de photons et montrer que le résultat obtenu confirme l'image de la cascade radiative de l'atome habillé donnée plus haut (§ C-2).

a) CALCUL DU SIGNAL DE CORRÉLATION DE PHOTONS

Dans (E.26), les opérateurs sont considérés dans le point de vue de Heisenberg. Par exemple

$$\mathcal{S}_+(t+\tau) = e^{iH(t+\tau-t_0)/\hbar} \mathcal{S}_+ e^{-iH(t+\tau-t_0)/\hbar} \quad (\text{E.27})$$

où H est l'hamiltonien (A.1) du système global « atome + mode laser + modes vides » et t_0 un instant initial. Les états du système global seront décrits en utilisant la base non couplée $|s, N; \{n_i\}\rangle$, où $s = a$ ou b , et où les n_i représentent les nombres de photons dans les modes autres que celui du laser. En particulier $|\{0\}\rangle$ représente le vide pour tous ces modes.

Soit $\sigma_{ALR}(t_0)$ l'opérateur densité du système global (pour plus de clarté, nous revenons dans ce paragraphe à des notations plus détaillées, du type σ_{ALR} pour le système global, σ_{AL} pour le système atome + mode laser...). Compte tenu de l'invariance d'une trace par permutation circulaire, (E.26) s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2(\tau) &= \text{Tr}[e^{iH(t-t_0)/\hbar} \mathcal{S}_+ \mathcal{S}_+(\tau) \mathcal{S}_-(\tau) \mathcal{S}_- e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \sigma_{ALR}(t_0)] \\ &= \text{Tr}[\mathcal{S}_+ \mathcal{S}_- e^{-iH\tau/\hbar} \mathcal{S}_- \sigma_{ALR}(t) \mathcal{S}_+ e^{iH\tau/\hbar}] \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

Nous avons utilisé la relation

$$e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \sigma_{ALR}(t_0) e^{iH(t-t_0)/\hbar} = \sigma_{ALR}(t) \quad (\text{E.29})$$

Par ailleurs, compte tenu de (B.10) et du fait que tous les opérateurs de (E.28) agissent dans l'espace des états du système global, l'opérateur $\mathcal{S}_+ \mathcal{S}_-$ s'écrit :

$$\mathcal{S}_+ \mathcal{S}_- = \sum_{N, \{n_i\}} |b, N; \{n_i\}\rangle \langle b, N; \{n_i\}| \quad (\text{E.30})$$

ce qui donne finalement pour la trace figurant dans (E.28)

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2(\tau) &= \\ &= \sum_{N, \{n_i\}} \langle b, N; \{n_i\} | e^{-iH\tau/\hbar} \mathcal{S}_- \sigma_{AL}(t) \mathcal{S}_+ e^{iH\tau/\hbar} | b, N; \{n_i\} \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.31})$$

Jusqu'ici, nous n'avons fait aucune approximation. Nous allons maintenant négliger les corrélations entre l'atome habillé (système $A + L$) et le réservoir R des modes vides, et approximer la matrice densité du système global par

$$\begin{aligned} \sigma_{ALR}(t) &\simeq \sigma_{AL}(t) \otimes | \{0\} \rangle \langle \{0\}| = \\ &= \sum_{\substack{s,N \\ s',N'}} |s, N; \{0\} \rangle \langle s, N| \sigma_{AL}(t) |s', N' \rangle \langle s', N'; \{0\}| \end{aligned} \quad (\text{E.32})$$

où $\sigma_{AL}(t)$ est la matrice densité de l'atome habillé. Une telle approximation a déjà été discutée en détail dans le paragraphe D-4 du chapitre IV. Elle est justifiée par le fait que les corrélations entre $A + L$ et le réservoir R à l'instant t s'évanouissent au bout d'un temps de l'ordre du temps de corrélation τ_c de R et ne sont donc pas importantes si on se limite dans (E.26) à des temps $\tau \gg \tau_c$. C'est d'ailleurs le même type d'approximation qui est utilisé pour établir le théorème de régression quantique.

L'approximation précédente et l'expression (B.10) de \mathcal{S}_\pm permettent d'écrire l'opérateur $\mathcal{S}_- \sigma_{ALR}(t) \mathcal{S}_+$ apparaissant dans (E.31) sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_- \sigma_{ALR}(t) \mathcal{S}_+ &= \\ &= \sum_{N', N''} |a, N'; \{0\} \rangle \langle b, N'| \sigma_{AL}(t) |b, N'' \rangle \langle a, N''; \{0\}| \end{aligned} \quad (\text{E.33})$$

Lorsqu'on porte cette expression dans (E.31), on voit apparaître le produit des amplitudes de probabilité

$$\langle b, N; \{n_i\} | \exp(-iH\tau/\hbar) |a, N'; \{0\} \rangle$$

et

$$\langle b, N; \{n_i\} | \exp(-iH\tau/\hbar) |a, N''; \{0\} \rangle^*$$

Or, la première amplitude n'est non négligeable que si $N' - 1 - N = \sum_i n_i$. En effet l'état $|a, N'\rangle$ appartient à la multiplicité $\mathcal{C}(N' - 1)$ de l'atome habillé tandis que l'état $|b, N\rangle$ appartient à la multiplicité $\mathcal{C}(N)$ et l'écart entre les numéros des deux multiplicités doit correspondre au nombre de photons émis spontanément. De même, l'autre

amplitude n'est non négligeable que si $N'' - 1 - N = \sum_i n_i$. On en déduit que les seuls termes non négligeables provenant de la double somme sur N' et N'' de (E.33) sont les termes $N' = N''$. Nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2(\tau) &= \sum_{N,N'} \left(\sum_{\{n_i\}} |\langle b,N; \{n_i\} | e^{-iH\tau/\hbar} |a,N'; \{0\} \rangle|^2 \right) \times \\ &\quad \times \langle b,N' | \sigma_{AL}(t) | b,N' \rangle \end{aligned} \quad (\text{E.34})$$

b) DISCUSSION PHYSIQUE

Interprétons le terme général de la somme figurant au second membre de (E.34). Le second facteur n'est autre que la population $\pi_{b,N}(t)$ de l'état $|b,N\rangle$ à l'instant t . Pour $t - t_0 \gg \Gamma^{-1}$, cette population tend vers la population quasi stationnaire $\pi_{b,N'}$. Quant au premier facteur, il représente physiquement la probabilité $\mathcal{P}(b,N;\tau|a,N';0)$ pour que l'atome habillé soit dans l'état $|b,N\rangle$ à l'instant τ sachant que le système est parti à l'instant 0 de l'état $|a,N'\rangle$. Comme l'évolution pendant ce temps τ est due, soit aux processus d'absorption et d'émission induite qui font osciller le système entre les états $|a,N'\rangle$ et $|b,N' - 1\rangle$, soit aux processus d'émission spontanée qui le font descendre vers les multiplicités inférieures (voir Fig. 6), $\mathcal{P}(b,N;\tau|a,N';0)$ n'est non nul que si $N = N' - 1, N' - 2, N' - 3\dots$ Finalement, nous avons montré que le signal de corrélation de photons (E.26) s'écrit

$$\sum_{N'} \sum_{p=1,2,3\dots} \mathcal{P}(b,N' - p;\tau|a,N';0) \pi_{b,N'} \quad (\text{E.35})$$

L'interprétation physique de (E.35) est très claire. Pour émettre le premier photon qui est détecté à l'instant t , l'atome doit être dans l'état excité b . C'est la raison pour laquelle la probabilité $\pi_{b,N'}$ de trouver l'atome dans l'état b,N' apparaît dans (E.35). Immédiatement après cette émission, l'atome se retrouve dans l'état a , les photons laser demeurant spectateurs : c'est le saut quantique $b,N' \rightarrow a,N'$ considéré dans le paragraphe C-2-a. Pour émettre le second photon qui va être détecté un instant τ après le premier, l'atome doit repasser de a à b pendant ce temps τ . Le second terme de (E.35) donne la probabilité d'un tel passage, qui est elle-même décomposée en plusieurs contributions $|a,N'\rangle \rightarrow |b,N' - p\rangle$ avec $p = 1, 2\dots$. Pour $p = 1$, le second photon détecté est émis à partir de $|b,N' - 1\rangle$ qui appartient à la même multiplicité que $|a,N'\rangle$. Le terme $p = 1$ de (E.35) correspond donc au cas où le second photon détecté à $t + \tau$ est le *premier* photon de fluorescence émis après le premier photon détecté à t . Le terme

$p = 2$, qui correspond à une émission à partir de $|b,N' - 2\rangle$, correspond au cas où le second photon détecté à $t + \tau$ est le second photon de fluorescence émis après le premier photon détecté à l'instant t , le premier photon de fluorescence (émis à partir de $|b,N' - 1\rangle$) n'ayant pas été détecté, et ainsi de suite... Nous voyons ainsi que le signal de corrélation de photons est parfaitement interprétable au moyen de l'image de la cascade radiative introduite plus haut.

Montrons enfin qu'il est possible de transformer l'expression (E.35). Le second terme de (E.35) ne dépend que de p et non de N' (pour N' variant à l'intérieur de la largeur ΔN de la distribution du nombre des photons laser). La somme sur p de ce terme représente la probabilité $\mathcal{P}(b;\tau|a;0)$ d'être dans b à l'instant τ si l'on part de a à l'instant 0. La somme sur N' du premier terme de (E.35) représente quant à elle la probabilité π_b d'être dans l'état b . Il est donc possible d'écrire (E.35) sous la forme

$$\mathcal{P}(b;\tau|a;0) \pi_b \quad (\text{E.36})$$

Le résultat (E.36) aurait pu être obtenu à partir des équations de Bloch optiques et du théorème de régression quantique (*). L'avantage du point de vue de l'atome habillé est de conduire à des expressions comme (E.35) où apparaissent explicitement les contributions des diverses étapes de la cascade radiative. En particulier, le terme $p = 1$ fait apparaître la fonction $\mathcal{P}(b,N' - 1;\tau|a,N';0)$ qui est directement reliée à la fonction $K(\tau)$ introduite plus haut (§ C-2-c) et donnant la répartition des délais entre deux émissions successives. On a en effet

$$K(\tau) = \Gamma \mathcal{P}(b,N' - 1;\tau|a,N';0) \quad (\text{E.37})$$

Une telle fonction n'est pas aisément calculable à partir des équations de Bloch optiques qui conduisent plutôt à la fonction

$$J(\tau) = \Gamma \mathcal{P}(b;\tau|a;0) \quad (\text{E.38})$$

donnant la répartition des délais entre deux émissions *quelconques* (non nécessairement successives).

Remarque

Comparons les deux fonctions $J(\tau)$ et $K(\tau)$ pour une excitation résonnante ($\delta_L = 0$) et saturante ($\Omega_1 \gg \Gamma$). On trouve à partir des équations de Bloch optiques

$$J(\tau) = \frac{\Gamma}{2} \left[1 - e^{-3\frac{\Gamma\tau}{4}} \cos \Omega_1 \tau \right] \quad (\text{E.39.a})$$

(*) Voir par exemple Cohen-Tannoudji, p. 98.

alors que l'expression (C.3) de $K(\tau)$ donne

$$K(\tau) = \frac{\Gamma}{2} [1 - \cos \Omega_1 \tau] e^{-\Gamma \frac{\tau}{2}} \quad (\text{E.39.b})$$

Pour $\tau \ll \Gamma^{-1}$, l'émission spontanée peut être négligée. Les deux fonctions sont alors égales et reflètent l'oscillation de Rabi résonnante entre $|a, N'\rangle$ et $|b, N' - 1\rangle$. Par contre, pour $\tau \gg \Gamma^{-1}$, $K(\tau)$ tend vers zéro (la première émission après la première détection a sûrement eu lieu) alors que $J(\tau)$ tend vers $\Gamma/2$ qui n'est autre que $\Gamma \pi_b''$. En effet, $\mathcal{P}(b; \tau | a; 0)$ a alors perdu tout souvenir des conditions initiales à $\tau = 0$ et tend vers la population stationnaire de b .

c) GÉNÉRALISATION À UN SYSTÈME À TROIS NIVEAUX : FLUORESCENCE INTERMITTENTE

Un autre avantage de la méthode de l'atome habillé, pour l'étude des corrélations de photons, est de pouvoir être aisément généralisée à des situations plus complexes que celles étudiées ici. Considérons par exemple le cas où deux transitions atomiques $a \leftrightarrow b$ et $a \leftrightarrow b'$ partant toutes deux de l'état fondamental a , et de fréquences propres ω_0 et ω'_0 , sont simultanément excitées par deux faisceaux laser L et L' de fréquences ω_L et ω'_L respectivement voisines de ω_0 et ω'_0 (Fig. 14). Les largeurs naturelles des niveaux excités b et b' sont notées Γ et Γ' .

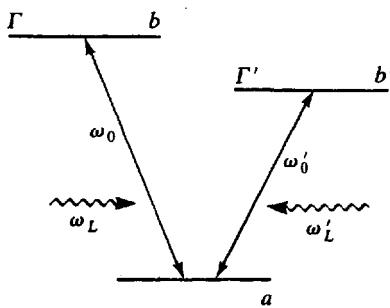


Figure 14. Configuration de niveaux permettant d'observer la fluorescence intermittente.

La fonction $K(\tau)$ donnant la répartition des délais τ entre deux émissions *successives* (que ces émissions aient lieu sur la transition $b \rightarrow a$ ou sur la transition $b' \rightarrow a$) peut être calculée par une méthode tout à fait analogue à celle du paragraphe C-2-c. Considérons pour cela l'atome habillé par les deux modes laser L et L' . Les niveaux non

couplés du système $A + L + L'$, repérés par les nombres quantiques atomiques a , b ou b' et les nombres N et N' de photons laser ω_L et ω'_L , se groupent maintenant en multiplicités $\mathcal{E}(N,N')$ de dimension 3 :

$$\mathcal{E}(N,N') = \{ |a,N+1,N'+1\rangle, |b,N,N'+1\rangle, |b',N+1,N'\rangle \} \quad (\text{E.40})$$

Immédiatement après l'émission d'un photon, l'atome est projeté dans l'état $|a\rangle$ et le système global se trouve par exemple dans l'état $|a,N+1,N'+1\rangle$ de $\mathcal{E}(N,N')$. Les interactions entre A et L et entre A et L' , caractérisées par les fréquences de Rabi Ω_1 et Ω'_1 , couplent un tel état aux deux autres états $|b,N,N'+1\rangle$ et $|b',N+1,N'\rangle$ de $\mathcal{E}(N,N')$ à partir desquels l'atome peut émettre spontanément un photon avec des taux Γ et Γ' . Tant que l'atome n'a pas émis spontanément de photon, le système reste dans la multiplicité $\mathcal{E}(N,N')$ et son évolution peut donc être décrite par un hamiltonien effectif non hermitique (voir chapitre III, § C-3). De manière plus précise, si

$$|\psi(t)\rangle = c_a(t)|a,N+1,N'+1\rangle + c_b(t)|b,N,N'+1\rangle + c_{b'}(t)|b',N+1,N'\rangle \quad (\text{E.41})$$

est la projection dans $\mathcal{E}(N,N')$ du vecteur d'état du système, les coefficients c_a , c_b , $c_{b'}$ obéissent à des équations couplées analogues à (C.2)

$$\begin{aligned} i\dot{c}_a &= (\Omega_1/2)c_b + (\Omega'_1/2)c_{b'} \\ i\dot{c}_b &= -\delta_L c_b - i(\Gamma/2)c_b + (\Omega_1/2)c_a \\ i\dot{c}_{b'} &= -\delta'_L c_{b'} - i(\Gamma'/2)c_{b'} + (\Omega'_1/2)c_a \end{aligned} \quad (\text{E.42})$$

où $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ et $\delta'_L = \omega'_L - \omega'_0$ sont les désaccords de fréquence des deux excitations laser.

La fonction $K(\tau)$ donnant la répartition des délais τ entre deux émissions successives est égale à la probabilité d'émission à l'instant τ d'un photon par l'atome habillé dans l'état (E.41), avec la condition initiale $|\psi(0)\rangle = |a,N+1,N'+1\rangle$. Elle est donc égale à

$$K(\tau) = \Gamma|c_b(\tau)|^2 + \Gamma'|c_{b'}(\tau)|^2 \quad (\text{E.43})$$

où $c_b(\tau)$ et $c_{b'}(\tau)$ sont les solutions des équations (E.42) satisfaisant aux conditions initiales $c_a(0) = 1$, $c_b(0) = c_{b'}(0) = 0$.

Les solutions $c_b(\tau)$ et $c_{b'}(\tau)$ des équations (E.42) sont des superpositions d'exponentielles $\exp(-\lambda_\alpha \tau)$ où les $-\lambda_\alpha$ sont les racines caractéristiques du système (E.42). Une situation particulièrement intéressante est celle où $\Gamma \gg \Gamma'$ (le niveau b' étant par exemple un niveau

métastable de durée de vie beaucoup plus longue que celle de b). Pour des valeurs suffisamment faibles de Ω'_1 , on trouve alors que l'une des racines $-\lambda_\alpha$ fait apparaître un temps d'amortissement (de l'ordre de $(\Gamma')^{-1}$) beaucoup plus long que les deux autres. Il s'ensuit que $K(\tau)$ a alors une composante qui décroît très lentement avec τ . Un tel résultat signifie qu'il y a une probabilité non nulle pour que deux émissions successives soient séparées par un temps très long, beaucoup plus long que le temps moyen (de l'ordre de Γ^{-1}) séparant deux émissions successives lorsque, seule, la transition $b \leftrightarrow a$ est excitée par un laser résonnant et intense. Le fait de rajouter l'excitation laser à ω'_L sur la transition $a \leftrightarrow b'$ peut donc arrêter la fluorescence de l'atome pendant un long intervalle de temps et faire apparaître des « périodes noires » dans cette fluorescence.

La méthode de l'atome habillé permet ainsi d'étudier simplement (*) ce phénomène de « fluorescence intermittente » dont l'interprétation qualitative est la suivante. Toute absorption d'un photon laser ω'_L par l'atome met ce dernier dans le niveau b' où il peut rester pendant un temps de l'ordre de $(\Gamma')^{-1}$ et se trouver ainsi soustrait à l'action du laser à ω_L . L'intérêt d'une telle méthode, dite « méthode de l'étagère » (**) est de permettre de détecter l'absorption d'un seul photon ω'_L (qui met l'atome sur « l'étagère » b') par l'*absence* d'un très grand nombre de photons de fluorescence sur la transition $a \leftrightarrow b$. Un autre intérêt est de permettre de détecter par l'arrêt ou le rétablissement de la fluorescence les « sauts quantiques » que l'atome effectue entre a et b' sous l'effet de l'excitation laser à ω'_L (***) . Plusieurs expériences ont permis d'observer de tels sauts quantiques sur un ion unique piégé (****).

Remarque

Une autre situation intéressante est celle d'un atome ayant deux niveaux inférieurs a et a' couplés tous deux à un même niveau excité b (voir Fig.15).

(*) Voir par exemple C. Cohen-Tannoudji et J. Dalibard, *Europhysics Letters* **1**, 441 (1986).

(**) Une telle méthode a été proposée par H.G. Dehmelt, *Bull. Amer. Phys. Soc.* **20**, 60 (1975).

(***) Le lien entre les sauts quantiques et la fluorescence intermittente a été souligné par R.J. Cook and H.J. Kimble, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1023 (1985).

(****) W. Nagourney, J. Sandberg and H. Dehmelt, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2797 (1986) ; Th. Sauter, W. Neuhauser, R. Blatt and P.E. Toschek, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1696 (1986) ; J.C. Bergquist, R.G. Hulet, W.M. Itano and D.J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1699 (1986).

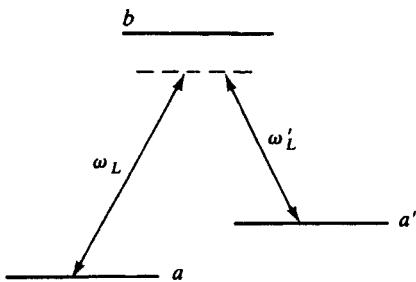


Figure 15. Configuration de niveaux permettant d'observer les résonances noires.

Lorsque les deux transitions $a \leftrightarrow b$ et $a' \leftrightarrow b$ sont simultanément excitées par deux faisceaux laser de fréquences ω_L et ω'_L telles que la condition de résonance Raman $\hbar(\omega_L - \omega'_L) = E'_a - E_a$ est satisfaite, on observe une disparition complète de toute fluorescence (« résonances noires ») (*). Dans le point de vue de l'atome habillé, un tel phénomène est dû à l'existence, dans chaque multiplicité $\mathcal{C}(N,N')$, d'un niveau habillé (c'est la combinaison linéaire de $|a',N,N'+1\rangle$ et $|a,N+1,N'\rangle$ non couplée à $|b,N,N'\rangle$ par l'interaction atome-laser) qui est stable vis-à-vis de l'émission spontanée, et dans lequel les atomes viennent se piéger (**).

4. Forces dipolaires

Pour terminer cette partie E, nous considérons maintenant le problème des forces dipolaires liées aux gradients d'amplitude du champ laser (voir § C-2-d du chapitre V). Nous introduisons tout d'abord des diagrammes d'énergie donnant les énergies des niveaux habillés en fonction de la position de l'atome dans le champ laser (§ a). Nous montrons ensuite comment ces diagrammes d'énergie permettent de comprendre simplement la valeur moyenne (§ b) et les fluctuations (§ c) des forces dipolaires.

(*) La première observation de ce phénomène est rapportée dans G. Alzetta, A. Gozzini, L. Moi and G. Orriols, *Il Nuovo Cimento* **36B**, 5 (1976).

(**) Voir par exemple P.M. Radmore and P.L. Knight, *J. Phys. B* **15**, 561 (1982); J. Dalibard, S. Reynaud et C. Cohen-Tannoudji, dans « Interaction of Radiation with Matter, A Volume in honour of Adriano Gozzini », Scuola Normale Superiore, Pisa 1987, p. 29.

a) NIVEAUX D'ÉNERGIE DE L'ATOME HABILLÉ DANS UNE ONDE LASER INHOMOGÈNE SPATIALEMENT

Si l'amplitude de l'onde associée au mode laser varie dans l'espace, il en est de même de la fréquence de Rabi Ω_1 qui dépend du point \mathbf{r} où se trouve l'atome et que nous noterons donc $\Omega_1(\mathbf{r})$ (*).

La figure 16 représente les variations, en fonction de la position \mathbf{r} de l'atome, des énergies des niveaux habillés des multiplicités $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N-1)$. Hors du faisceau laser, $\Omega_1(\mathbf{r})$ tend vers zéro et ces niveaux se raccordent aux états non couplés $|a, N+1\rangle$ et $|b, N\rangle$ pour $\mathcal{E}(N)$, $|a, N\rangle$ et $|b, N-1\rangle$ pour $\mathcal{E}(N-1)$, séparés par $\hbar\delta_L$ (la figure est faite pour $\delta_L > 0$). A l'intérieur du faisceau laser, $\Omega_1(\mathbf{r})$ est non nul et l'écart

$$\hbar\Omega(\mathbf{r}) = \hbar \sqrt{\Omega_1^2(\mathbf{r}) + \delta_L^2} \quad (\text{E.44})$$

entre les deux niveaux habillés d'une même multiplicité est d'autant plus grand que $\Omega_1^2(\mathbf{r})$ est plus grand.

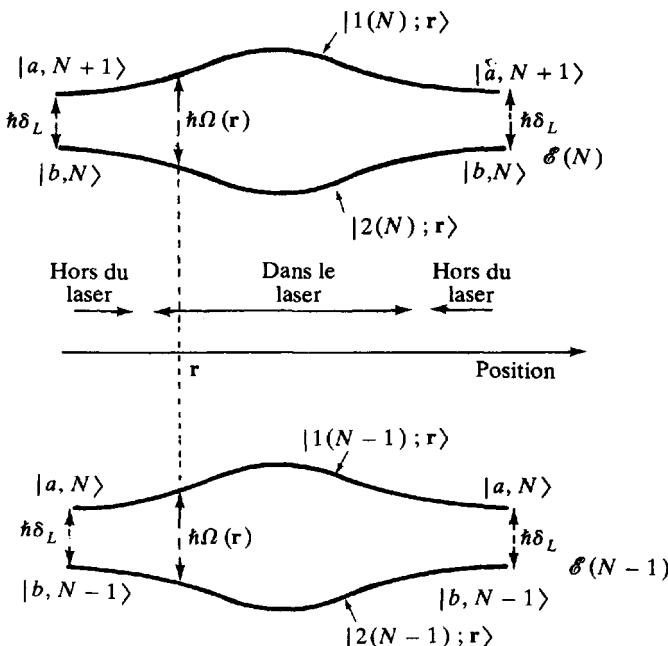


Figure 16. Variations, en fonction de la position \mathbf{r} de l'atome, des énergies de quelques niveaux de l'atome habillé.

(*) Les modes propres utilisés pour quantifier le champ ne sont pas ici des ondes planes, mais des modes reproduisant la dépendance spatiale du champ laser.

Commençons par négliger l'émission spontanée. Supposons que le système soit dans l'état $|1(N)\rangle$ ou $|2(N)\rangle$ et que l'état externe de l'atome soit décrit par un paquet d'ondes de dimensions très petites (devant la longueur d'onde du champ laser) et se déplaçant suffisamment lentement pour qu'on puisse négliger toute transition non adiabatique d'un niveau à l'autre. Le système va alors suivre adiabatiquement le niveau $|1(N)\rangle$ ou $|2(N)\rangle$ dans lequel il se trouve initialement, et les courbes d'énergie de la figure 16 apparaissent dans ce cas comme des courbes d'énergie potentielle $V_{1N}(\mathbf{r})$ et $V_{2N}(\mathbf{r})$. L'atome habillé subit donc une force

$$\mathbf{F}_1 = -\nabla V_{1N}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar}{2}\nabla\Omega(\mathbf{r}) \quad (\text{E.45.a})$$

s'il est sur un niveau de type 1 et une force

$$\mathbf{F}_2 = -\nabla V_{2N}(\mathbf{r}) = +\frac{\hbar}{2}\nabla\Omega(\mathbf{r}) = -\mathbf{F}_1 \quad (\text{E.45.b})$$

s'il est sur un niveau de type 2. Nous aboutissons ainsi à l'image d'une force agissant sur l'atome habillé et qui dépend du type d'état interne 1 ou 2 dans lequel il se trouve. Il s'agit en quelque sorte d'un « effet Stern et Gerlach optique » tout à fait analogue à l'effet Stern et Gerlach habituel se produisant pour un spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique inhomogène.

L'émission spontanée fait cascader l'atome habillé le long de son diagramme d'énergie. Les transitions radiatives qu'il subit peuvent changer le type d'état (1 ou 2) dans lequel il se trouve (par exemple, la transition $|1(N)\rangle \rightarrow |2(N-1)\rangle$) le fait passer d'un état 1 à un état 2), ce qui fait changer brusquement le signe de la force qui agit sur lui. Nous aboutissons ainsi à l'image physique d'une force lumineuse agissant sur l'atome et dont le signe change aléatoirement au cours du temps.

b) INTERPRÉTATION DE LA FORCE DIPOLAIRE MOYENNE

En régime stationnaire, la force dipolaire moyenne apparaît comme la moyenne des forces \mathbf{F}_1 et $\mathbf{F}_2 = -\mathbf{F}_1$ données en (E.45), pondérées par les proportions de temps passées dans les niveaux de type 1 et 2, qui ne sont autres que les populations réduites stationnaires π_1^{st} et π_2^{st} introduites dans le paragraphe D-2-d plus haut.

$$\langle \mathbf{F}_{\text{dip}} \rangle = \mathbf{F}_1 \pi_1^{st} + \mathbf{F}_2 \pi_2^{st} = -\frac{\hbar}{2}\nabla\Omega(\mathbf{r}) [\pi_1^{st} - \pi_2^{st}] \quad (\text{E.46})$$

Compte tenu, des valeurs données plus haut à la limite séculaire pour $\Omega(\mathbf{r})$, π_1^{st} et π_2^{st} (voir (E.44), (D.21) et la définition (B.21) de

θ), on peut montrer que l'expression (E.46) coïncide bien avec la valeur trouvée au paragraphe C-2-d du chapitre V à partir des équations de Bloch optiques (voir référence à la fin du chapitre).

Nous nous contenterons ici d'interpréter le signe de $\langle F_{\text{dip}} \rangle$ (voir Fig. 17). Pour $\omega_L > \omega_0$ ($\delta_L > 0$) (Fig. 17. α), c'est le niveau $|1(N)\rangle$ qui se raccorde à $|a, N+1\rangle$ hors du faisceau laser. Ce niveau est donc moins contaminé par $|b, N\rangle$ que l'autre niveau habillé $|2(N)\rangle$. Il est par suite plus stable et donc plus peuplé : $\pi_1^{\text{st}} > \pi_2^{\text{st}}$. L'atome habillé passe donc plus de temps sur les niveaux de type 1 où il est poussé hors du faisceau laser. La force dipolaire moyenne est donc expulsante hors des régions de haute intensité. Ces conclusions sont inversées pour $\omega_L < \omega_0$ ($\delta_L < 0$), où c'est le niveau $|2(N)\rangle$ qui se raccorde à $|a, N+1\rangle$ et qui est donc le plus peuplé : $\pi_2^{\text{st}} > \pi_1^{\text{st}}$ (voir Fig. 17. β). Pour $\omega_L = \omega_0$, la force dipolaire moyenne attire donc l'atome vers les régions de haute intensité. Enfin, pour $\omega_L = \omega_0$ ($\delta_L = 0$), les deux niveaux habillés sont également contaminés par $|a, N+1\rangle$, $\pi_1^{\text{st}} = \pi_2^{\text{st}}$ et $\langle F_{\text{dip}} \rangle = 0$.

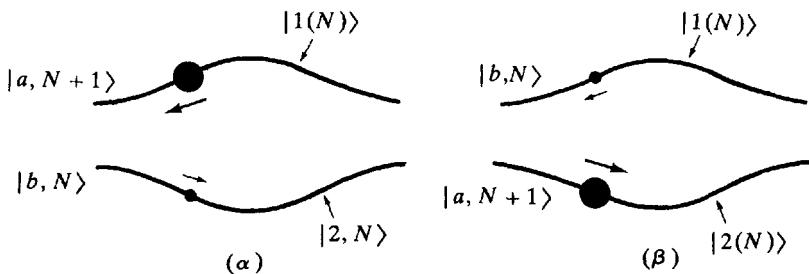


Figure 17. Niveaux habillés et populations réduites stationnaires pour un désaccord $\delta_L > 0$ (Fig. α) et pour un désaccord $\delta_L < 0$ (Fig. β).

c) FLUCTUATIONS DE LA FORCE DIPOLAIRE

La figure 18 représente l'évolution au cours de temps de la force instantanée agissant sur l'atome. Cette force bascule à des instants aléatoires entre ses deux valeurs possibles F_1 et $F_2 = -F_1$ (voir (E.45)). Les intervalles de temps τ_1 et τ_2 passés dans chaque niveau habillé de type 1 ou 2 entre deux sauts successifs sont des variables aléatoires, dont les valeurs moyennes sont de l'ordre de Γ^{-1} pour une excitation quasi résonnante.

La force fluctuante de la figure 18 produit une diffusion de l'impulsion atomique caractérisée par le coefficient de diffusion

$$D_{\text{dip}} = \int_0^\infty d\tau [\langle F_{\text{dip}}(t) F_{\text{dip}}(t + \tau) \rangle - \langle F_{\text{dip}} \rangle^2] \quad (\text{E.47})$$

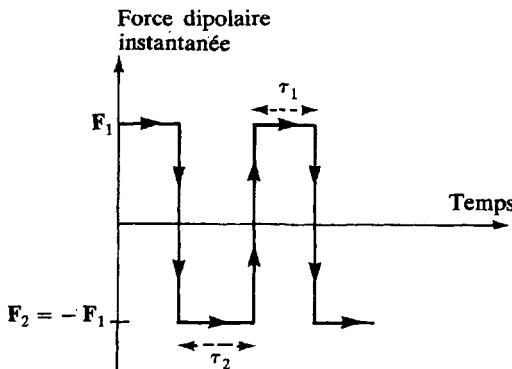


Figure 18. Variations au cours du temps de la force dipolaire instantanée agissant sur l'atome.

L'ordre de grandeur de ce coefficient est donné par le produit de la valeur du crochet de (E.47) en $\tau = 0$, qui est égale à F_1^2 , par le temps de corrélation de la force fluctuante de la figure 18 qui est de l'ordre de $\langle \tau_1 \rangle \sim \langle \tau_2 \rangle \sim \Gamma^{-1}$. À résonance, $F_1 \sim -\hbar \nabla \Omega_1$, de sorte que :

$$D_{\text{dip}} \sim \frac{\hbar^2 (\nabla \Omega_1)^2}{\Gamma} \quad (\text{E.48})$$

Nous voyons sur (E.48) que le coefficient de diffusion associé aux forces dipolaires croît très vite avec l'intensité laser, comme Ω_1^2 , alors que la profondeur maximale des puits du potentiel associés à une telle force ne croît que comme Ω_1 (voir paragraphe C-2-d du chapitre V). On comprend ainsi pourquoi l'échauffement associé à D_{dip} rend difficile le piégeage d'atomes neutres par des forces dipolaires (*).

RÉFÉRENCES GÉNÉRALES

C. Cohen-Tannoudji et S. Reynaud in « Multiphoton Processes » eds J. Eberly and P. Lambropoulos, Wiley 1978, p. 103 ; S. Reynaud, Thèse Paris 1981, Ann. Phys. Fr. **8**, 315 (1983) et **8**, 371 (1983).

Application aux spectres de fluorescence et d'absorption

C. Cohen-Tannoudji et S. Reynaud, J. Phys. **B10**, 345 (1977). Pour

(*) Un calcul plus précis de l'intégrale (E.47) et une discussion plus quantitative des fluctuations des forces radiatives sont présentés dans la référence donnée à la fin du chapitre.

les systèmes à trois niveaux, voir aussi C. Cohen-Tannoudji et S. Reynaud, J. Phys. **B10**, 365 (1977) et J. Phys. **B10**, 2311 (1977).

Application aux corrélations de photons

C. Cohen-Tannoudji et S. Reynaud, Phil. Trans. Roy. Soc. London **A293**, 233 (1979).

Application aux forces dipolaires

J. Dalibard et C. Cohen-Tannoudji, J.O.S.A. **B2**, 1707 (1985).

Autres applications

La méthode de l'atome habillé a été appliquée également à d'autres problèmes comme le mélange à quatre ondes : G. Grynberg, M. Pinard et P. Verkerk, Opt. Commun. **50**, 261 (1984) et J. Physique **47**, 617 (1986).

Pour les applications dans le domaine des radiofréquences et celui des collisions, voir les références des compléments A_{VI} et B_{VI} .

Autres approches théoriques apparentées à la méthode de l'atome habillé

Atome à deux niveaux dans une cavité monomode réelle : E.T. Jaynes and F.W. Cummings, Proc. I.E.E.E. **51**, 89 (1963).

Utilisation du théorème de Floquet et d'états quasi périodiques dans une approche semi classique : J.H. Shirley, Phys. Rev. **138**, B979 (1965) ; Ya.B. Zel'dovich, Sov. Phys. J.E.T.P. **24**, 1006 (1967) ; Shih-I Chu, Adv. At. Mol. Phys. **21**, 197 (1985) et références in.

COMPLÉMENT A_{VI}

**L'ATOME HABILLÉ
DANS LE DOMAINE DES RADIOFRÉQUENCES**

Dans le chapitre, nous avons introduit le point de vue de l'atome habillé pour décrire un atome en interaction résonnante ou quasi résonnante avec un faisceau laser. Le même point de vue peut être utilisé pour décrire l'effet des transitions (réelles ou virtuelles) induites par un champ de radiofréquence entre des niveaux de structure fine, hyperfine ou entre des sous-niveaux Zeeman de l'atome.

Par rapport au domaine optique, deux différences apparaissent. D'une part, l'émission spontanée sur la transition étudiée est négligeable, ce qui simplifie les équations d'évolution. D'autre part, le nombre fini de niveaux à prendre en compte permet d'aborder simplement des situations de champs intenses où la fréquence de Rabi est du même ordre ou plus grande que la fréquence de la transition (*).

Le but de ce complément est de présenter le cas particulièrement simple d'un système à deux niveaux interagissant avec un champ de radiofréquence, l'écart $\hbar\omega_{ab}$ entre les deux niveaux atomiques non perturbés pouvant être varié au moyen d'un paramètre extérieur (par exemple un champ magnétique statique). Le diagramme d'énergie de l'atome habillé présente alors une infinité de niveaux d'énergie dont les variations avec $\hbar\omega_{ab}$ font apparaître des « croisements » ou des « anticroisements » de niveaux. Aussi, nous commençons (§ 1) par rappeler dans quelles conditions des résonances peuvent être associées à des croisements ou des anticroisements de niveaux d'énergie. Nous présentons ensuite (§ 2) le système étudié, un spin $\frac{1}{2}$ placé dans un champ magnétique et interagissant avec un champ de radiofréquence. Deux polarisations du champ sont plus particulièrement considérées. Pour une polarisation circulaire (§ 3), les calculs peuvent être menés exactement. Cet exemple permet de dégager les propriétés de la résonance magnétique (fréquence de Larmor des spins ω_0 égale à la fréquence du rayonnement ω), ainsi que celles de résonances de cohérence observables au voisinage de $\omega_0 = 0$ ou $\omega_0 = 2\omega$, pour des intensités arbitrairement élevées du champ de radiofréquence. L'étude

(*) Bien sûr, de telles situations peuvent aussi être envisagées dans le domaine optique. Mais à de telles intensités, les niveaux d'une transition optique sont en général couplés de façon importante à plusieurs autres niveaux excités, en particulier à des continuums d'ionisation. Le calcul des phénomènes non linéaires correspondants est alors beaucoup plus complexe. Dans le domaine des radiofréquences au contraire, les structures à l'intérieur d'un niveau sont considérablement plus petites que les écarts optiques entre niveaux.

de la polarisation linéaire (§ 4) permet par ailleurs de traiter plusieurs exemples d'effets d'ordre supérieur calculables (transitions à plusieurs quanta, déplacement radiatif des résonances, modification des propriétés magnétiques de l'atome).

Tous ces effets pourraient évidemment être étudiés à partir d'une description classique du système utilisant les équations de Bloch. La méthode de l'atome habillé permet une analyse plus globale : elle présente l'avantage de relier tous les phénomènes de résonance observables aux propriétés du diagramme d'énergie d'un hamiltonien indépendant du temps.

1. Généralités sur les résonances de croisement et d'anticroisement

Considérons un système d'hamiltonien non perturbé H_0 et deux de ses états propres $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$, d'énergies E_a et E_b proches l'une de l'autre. Lorsqu'on ajoute une perturbation V , les énergies et les fonctions d'onde de ces états sont perturbées, d'une façon qui dépend essentiellement de l'écart d'énergie entre les niveaux et des propriétés de V . Dans ce paragraphe, nous introduisons les notions d'anticroisement et de croisement de niveaux d'énergie et nous montrons que des résonances de nature différente peuvent leur être associées.

a) ANTICROISEMENT SIMPLE SUR UN SYSTÈME À DEUX NIVEAUX

Considérons tout d'abord le cas simple où V ne fait que coupler entre eux les états $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$:

$$V_{aa} = V_{bb} = 0 \quad ; \quad V_{ab} = \hbar\Omega_1/2 \quad (\text{supposé réel}) \quad (1)$$

et notons

$$\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar \quad (2)$$

Les énergies des deux niveaux perturbés sont :

$$E_1 = \frac{E_a + E_b}{2} + \frac{\hbar\Omega}{2} \quad (3.a)$$

$$E_2 = \frac{E_a + E_b}{2} - \frac{\hbar\Omega}{2} \quad (3.b)$$

avec

$$\Omega = \sqrt{\omega_{ab}^2 + \Omega_1^2} \quad (4)$$

En fonction de ω_{ab} , les énergies E_1 et E_2 varient comme les deux branches d'une hyperbole admettant E_a et E_b comme asymptotes (Fig. 1). Elles forment un anticroisement simple.

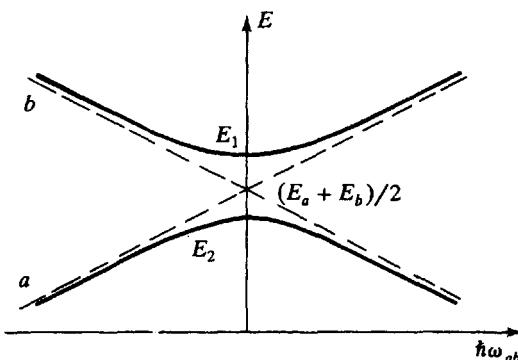


Fig. 1. Anticroisement simple. Variations avec $\hbar\omega_{ab}$ des énergies non perturbées E_a et E_b (prises respectivement égales à $\hbar\omega_{ab}/2$ et $-\hbar\omega_{ab}/2$ et représentées en traits tordus), et des énergies perturbées (représentées en traits pleins).

Les états perturbés $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_2\rangle$ sont donnés par

$$|\chi_1\rangle = \sin \theta |\varphi_a\rangle + \cos \theta |\varphi_b\rangle \quad (5.a)$$

$$|\chi_2\rangle = \cos \theta |\varphi_a\rangle - \sin \theta |\varphi_b\rangle \quad (5.b)$$

avec

$$\cotg 2\theta = -\frac{\omega_{ab}}{\Omega_1}, \quad 0 \leq 2\theta < \pi \quad (6)$$

Au milieu de l'anticroisement ($E_a = E_b$), les états propres sont des superpositions de $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ avec des amplitudes égales.

L'évolution temporelle du système, et en particulier l'amplitude de transition de l'état $|\varphi_a\rangle$ vers l'état $|\varphi_b\rangle$, peuvent être déterminées par différentes méthodes. En prévision de situations plus complexes, utilisons ici la méthode de la résolvante. L'élément de matrice $G_{ba}(z)$, qui vaut d'après la formule (C.48) du chapitre III,

$$G_{ba}(z) = \frac{V_{ba}}{(z - E_a)(z - E_b) - |V_{ab}|^2} \quad (7)$$

admet E_1 et E_2 comme pôles. L'amplitude de transition $U_{ba}(t)$, avec $t > 0$, s'en déduit par l'intégrale habituelle (voir (A.22) du chapitre III)

$$\begin{aligned} U_{ba}(t) &= \frac{1}{2i\pi} \int_{C_+} dz e^{-izt/\hbar} G_{ba}(z) \\ &= V_{ba} \left[\frac{1}{E_1 - E_2} \exp(-iE_1 t/\hbar) + \frac{1}{E_2 - E_1} \exp(-iE_2 t/\hbar) \right] \\ &= \frac{-i\Omega_1}{\Omega} \exp[-i(E_1 + E_2)t/2\hbar] \sin \frac{\Omega t}{2} \end{aligned} \quad (8)$$

La probabilité de transition $P_{ba}(t) = |U_{ba}(t)|^2$ vaut alors, compte tenu de (4) :

$$P_{ba}(t) = \frac{\Omega_1^2}{\omega_{ab}^2 + \Omega_1^2} \sin^2 \left[\sqrt{\omega_{ab}^2 + \Omega_1^2} \frac{t}{2} \right] \quad (9)$$

Elle fait apparaître les oscillations de Rabi dont l'amplitude vaut 1 au centre de l'anticroisement. L'amplitude des oscillations décroît lorsqu'on s'en écarte, tandis que leur fréquence augmente.

Dans de nombreuses expériences, on ne peut observer l'oscillation de Rabi indéfiniment en raison de la durée de vie finie du système. Par exemple, si les niveaux étudiés sont deux sous-niveaux d'un état atomique excité de durée de vie $1/\Gamma$, l'émission spontanée fait disparaître le système au bout d'un intervalle de temps aléatoire t dont la distribution est donnée par

$$\mathcal{P}(t) = \Gamma \exp(-\Gamma t) \quad (10)$$

Pour des sous-niveaux fondamentaux, la durée de vie des niveaux est infinie, mais le système peut se déplacer et quitter la région d'observation, ou encore l'oscillation de Rabi peut être interrompue par un processus de relaxation résultant de l'interaction du système avec son environnement.

Dans la plupart des cas, il est nécessaire de renouveler en permanence le système observé par un processus de préparation adéquat (excitation optique, alimentation par un jet atomique d'une cellule contenant les atomes observés, ...). Nous supposerons ici que les systèmes étudiés sont préparés en permanence dans l'état $|\varphi_a\rangle$ et qu'ils évoluent sous l'action de l'hamiltonien $H_0 + V$ pendant un temps t aléatoire dont la distribution est donnée par (10), l'observation portant sur la population moyenne de l'état $|\varphi_b\rangle$. Or, cette dernière quantité n'est autre que la moyenne \bar{P}_{ba} de $P_{ba}(t)$ avec le poids (10) :

$$\bar{P}_{ba} = \int_0^\infty dt \Gamma \exp(-\Gamma t) P_{ba}(t) \quad (11.a)$$

soit encore, compte tenu de (9)

$$\begin{aligned} \overline{P_{ba}} &= \frac{1}{2} \frac{\Omega_1^2}{\Omega^2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{\Gamma - i\Omega} + \frac{\Gamma}{\Gamma + i\Omega} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{\Omega_1^2}{\Gamma^2 + \Omega_1^2 + \omega_{ab}^2} \end{aligned} \quad (11.b)$$

Ainsi, dans les conditions de préparation et de détection décrites précédemment, l'anticroisement se manifeste par un transfert de

population de $|\varphi_a\rangle$ à $|\varphi_b\rangle$, résonnant au centre de l'anticroisement ($\omega_{ab} = 0$). Ce transfert résonnant est proportionnel à Ω_1^2 pour $\Omega_1 \ll \Gamma$, et tend vers une limite égale à $\frac{1}{2}$ pour $\Gamma \ll \Omega_1$. La demi-largeur de la résonance (variation de \bar{P}_{ab} avec ω_{ab}) est $[\Gamma^2 + \Omega_1^2]^{\frac{1}{2}}$. Le fait que la largeur de la résonance augmente avec l'intensité Ω_1 du couplage est désigné parfois sous le nom « d'élargissement radiatif ».

b) ANTICROISEMENT D'ORDRE SUPÉRIEUR

Il est possible que la perturbation V ne couple pas directement l'état $|\varphi_a\rangle$ à l'état $|\varphi_b\rangle$ ($V_{ab} = 0$), mais que ce couplage existe à des ordres supérieurs par l'intermédiaire d'un ou plusieurs niveaux $|\varphi_c\rangle$, dont les énergies sont éloignées de E_a et E_b . De façon plus précise, nous supposerons :

$$|V_{ac}| \ll |E_a - E_c| \quad (12)$$

Pour calculer l'amplitude de transition $U_{ba}(t)$, considérons alors la restriction de la résolvante au sous-espace sous-tendu par $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$. Si P est le projecteur sur ce sous-espace, l'expression de $P G(z)P$ est donnée par l'équation (B.23) du chapitre III :

$$PG(z)P = \frac{P}{z - H_0 - PR(z)P} \quad (13)$$

Dans la mesure où les niveaux d'énergie E_a et E_b sont proches l'un de l'autre et éloignés des autres niveaux $|\varphi_c\rangle$, l'opérateur déplacement $R(z)$ peut être approximé par sa valeur pour $z = E_0 = (E_a + E_b)/2$. Cela revient (comme nous l'avons vu dans le paragraphe B-3 du chapitre III) à décrire l'évolution temporelle dans le sous-espace \mathcal{E}_0 au moyen de l'hamiltonien effectif

$$H_{eff} = \begin{pmatrix} E_a + R_{aa}(E_0) & R_{ab}(E_0) \\ R_{ba}(E_0) & E_b + R_{bb}(E_0) \end{pmatrix} \quad (14)$$

Compte tenu de la condition (12), il est suffisant de ne garder dans le développement de $R(E_0)$ (voir formule (B.22) du chapitre III) que le premier terme non nul. Soit p l'ordre du premier terme non nul de l'élément non diagonal $R_{ab}(E_0)$. En ce qui concerne les deux éléments diagonaux, il convient de noter que, pour toute valeur finie de p , il existe au moins un élément V_{ac} et un autre V_{bc} non nuls. Les termes d'ordre deux du développement de $R_{aa}(E_0)$ et $R_{bb}(E_0)$ sont donc nécessairement non nuls, et ce sont les termes prépondérants dans la mesure où nous supposons toujours $V_{aa} = V_{bb} = 0$.

Avec ces approximations, nous sommes ramenés au problème du

paragraphe précédent à la substitution près

$$E_i \rightarrow \tilde{E}_i = E_i + R_{ii}(E_0) \quad (i = a, b) \quad (15.a)$$

$$V_{ab} \rightarrow R_{ab}(E_0) \quad (15.b)$$

Les niveaux $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ sont tout d'abord déplacés des quantités $R_{aa}(E_0)$ et $R_{bb}(E_0)$, de sorte que leur point de croisement $\tilde{E}_a = \tilde{E}_b$ s'est déplacé de

$$\hbar\delta\omega_{ab} = -[R_{aa}(E_0) - R_{bb}(E_0)] \quad (16)$$

(voir fig. 2). De plus, ces niveaux sont couplés par $R_{ab}(E_0)$ et forment un anticroisement. La distance minimum entre les deux niveaux E_1 et E_2 est $R_{ab}(E_0)$, donc d'ordre p en V . On dit qu'il s'agit d'un anticroisement d'ordre p . Il est à noter, que si $p > 2$, le déplacement des niveaux, d'ordre 2, est bien plus important que l'amplitude de l'anticroisement.

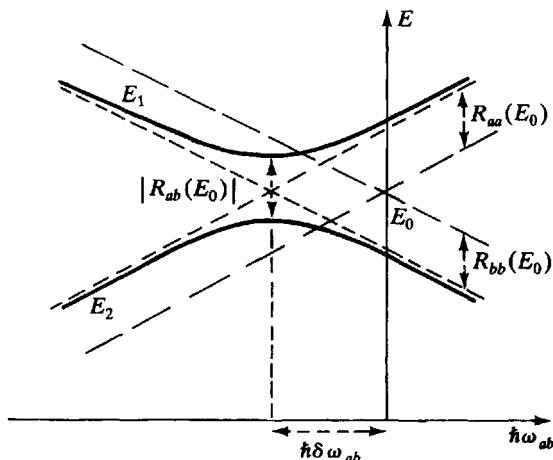


Fig. 2. Anticroisement d'ordre supérieur. Comme sur la figure 1, les droites en tirets longs représentent les énergies des niveaux non perturbés $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$. Les droites en tirets courts représentent les niveaux déplacés par les quantités R_{aa} et R_{bb} . Les courbes en traits pleins représentent les niveaux perturbés qui s'anticroisent.

Le calcul de $U_{ba}(t)$ à partir de l'expression

$$G_{ba}(z) = \frac{R_{ba}(E_0)}{(z - \tilde{E}_a)(z - \tilde{E}_b) - |R_{ab}(E_0)|^2} \quad (17)$$

permet d'associer à ces anticroisements d'ordre supérieur les mêmes phénomènes physiques que pour l'anticroisement simple : oscillation de Rabi sur $P_{ba}(t)$, résonance sur \tilde{P}_{ba} . Il suffit de faire les substitutions (15) dans (9) et (11). Les seuls phénomènes nouveaux sont, d'une part le déplacement du centre de la résonance lié au remplacement de E_a et E_b par \tilde{E}_a et \tilde{E}_b , d'autre part l'élargissement radiatif de la résonance qui varie en $|R_{ab}|$, donc en $|V|^p$, et non plus en $\Omega_1 \sim |V|$.

c) CROISEMENT DE NIVEAUX. RÉSONANCE DE COHÉRENCE

Il peut se faire que $R_{ba}(z)$ soit nul à tous les ordres, pour des raisons de symétrie par exemple, les états $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ appartenant à deux sous-espaces qui ne sont pas connectés par la perturbation V . Les niveaux d'énergies continuent alors à se croiser, tout en étant déplacés. Leurs énergies \tilde{E}_a et \tilde{E}_b sont solutions des équations implicites

$$\tilde{E}_a = E_a + R_{aa}(\tilde{E}_a) \quad ; \quad \tilde{E}_b = E_b + R_{bb}(\tilde{E}_b) \quad (18)$$

Les états propres correspondants seront notés $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ et $|\tilde{\varphi}_b\rangle$. L'évolution temporelle respecte la symétrie tout comme l'hamiltonien, de sorte que

$$\langle \varphi_b | U(t) | \varphi_a \rangle = \langle \tilde{\varphi}_b | U(t) | \tilde{\varphi}_a \rangle = 0 \quad (19)$$

Il n'y a pas de transitions induites par V entre le niveau $|\varphi_a\rangle$ et le niveau $|\varphi_b\rangle$.

Malgré l'absence de transition, on peut observer une résonance au point de croisement déplacé défini par

$$\tilde{E}_a = \tilde{E}_b \quad (20)$$

si les systèmes sont préparés dans une superposition des états $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ et $|\tilde{\varphi}_b\rangle$:

$$|\psi_i\rangle = \lambda_a |\tilde{\varphi}_a\rangle + \lambda_b |\tilde{\varphi}_b\rangle + \dots \quad (21)$$

et détectés dans un état $|\psi_f\rangle$, lui aussi superposition de $|\tilde{\varphi}_a\rangle$ et $|\tilde{\varphi}_b\rangle$

$$|\psi_f\rangle = \mu_a |\tilde{\varphi}_a\rangle + \mu_b |\tilde{\varphi}_b\rangle + \dots \quad (22)$$

(les points de suspension indiquent que $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ peuvent avoir des composantes non nulles sur d'autres états). Cette résonance est liée à l'interférence, dans l'amplitude de transition de $|\psi_i\rangle$ vers $|\psi_f\rangle$, entre deux termes associés à deux « chemins » passant respectivement par

$|\tilde{\varphi}_a\rangle$ ou $|\tilde{\varphi}_b\rangle$. De manière plus précise, la contribution de ces deux termes à l'amplitude de transition s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle \psi_f | U(t) | \psi_i \rangle &= \langle \psi_f | \tilde{\varphi}_a \rangle \exp(-i\tilde{E}_a t/\hbar) \langle \tilde{\varphi}_a | \psi_i \rangle + \\ &\quad + \langle \psi_f | \tilde{\varphi}_b \rangle \exp(-i\tilde{E}_b t/\hbar) \langle \tilde{\varphi}_b | \psi_i \rangle \\ &= \mu_a^* \lambda_a \exp(-i\tilde{E}_a t/\hbar) + \mu_b^* \lambda_b \exp(-i\tilde{E}_b t/\hbar) \quad (23)\end{aligned}$$

Dans la probabilité de transition $P_{fi}(t)$, l'interférence entre les deux termes de (23) donne lieu à une modulation à la fréquence $\tilde{\omega}_{ab} = (\tilde{E}_b - \tilde{E}_a)/\hbar$:

$$\begin{aligned}P_{fi}(t) &= |\mu_a|^2 |\lambda_a|^2 + |\mu_b|^2 |\lambda_b|^2 + \\ &\quad + [\mu_a^* \mu_b \lambda_a \lambda_b^* \exp(-i\tilde{\omega}_{ab} t) + c.c.] \quad (24)\end{aligned}$$

qui se traduit sur la probabilité moyennée \bar{P}_{fi} définie en (11.a), par un terme résonnant en $\tilde{\omega}_{ab} = 0$:

$$\begin{aligned}\bar{P}_{fi} &= |\mu_a|^2 |\lambda_a|^2 + |\mu_b|^2 |\lambda_b|^2 + \\ &\quad + \left[\mu_a^* \mu_b \lambda_a \lambda_b^* \frac{\Gamma}{\Gamma + i\tilde{\omega}_{ab}} + c.c. \right] \quad (25)\end{aligned}$$

Il est à noter que la résonance n'est observable que si les quatre nombres $\lambda_a, \lambda_b, \mu_a, \mu_b$ sont simultanément non nuls. Il faut donc préparer et détecter des superpositions cohérentes des niveaux qui se croisent. Ce type de résonance est ainsi appelé résonance de cohérence (*).

Remarque

Il peut arriver que deux niveaux $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ soient couplés de manière indirecte par $R_{ab}(E)$, mais que ce couplage tende vers zéro lorsqu'on se rapproche du point de croisement. On peut alors montrer qu'en dépit de leur couplage les niveaux perturbés continuent à se croiser. Les résonances observées au voisinage d'un tel croisement sont très analogues aux résonances de cohérence, mais elles peuvent apparaître même si le système est préparé dans l'état $|\varphi_a\rangle$ et détecté dans l'état $|\varphi_b\rangle$ (**).

(*) Un exemple concret de résonance de croisement de niveaux (effet Hanle ou Franken) est étudié dans l'exercice 6.

(**) Pour plus de détails, voir G. Grynberg, J. Dupont-Roc, S. Haroche et C. Cohen-Tannoudji, J. Physique 34, 523 (1973) et 34, 537 (1973).

2. Spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence

a) DESCRIPTION DU SYSTÈME

Les structures fines, hyperfines ou Zeeman des atomes et des molécules font intervenir un nombre fini de niveaux, souvent très proches les uns des autres en comparaison des excitations électroniques. Nous considérons ici le cas le plus simple où il n'y a que deux niveaux. Un modèle d'un tel système est fourni par un atome paramagnétique supposé fixe à l'origine, portant un spin $\frac{1}{2}$ et plongé dans un champ magnétique \mathbf{B}_0 . Le moment magnétique μ associé au spin S est donné par

$$\mu = \gamma \hbar S \quad (26)$$

où γ est le rapport gyromagnétique, et où S_x, S_y, S_z sont les trois matrices de Pauli, multipliées par $\frac{1}{2}$. La vitesse angulaire de précession du spin autour de la direction $0z$ du champ magnétique \mathbf{B}_0 est

$$\omega_0 = -\gamma B_0 \quad (27)$$

Un tel spin est supposé interagir de plus avec un champ de radiofréquence monochromatique. Comme les variations spatiales du champ de radiofréquence sont négligeables à l'échelle atomique, l'atome n'est sensible qu'à la valeur $\mathbf{B}_1(\mathbf{0},t)$ de ce champ au point $\mathbf{0}$ où il se trouve. Un mode k du champ libre peut alors être utilisé pour modéliser l'action de $\mathbf{B}_1(\mathbf{0},t)$ sur l'atome pourvu que sa fréquence ω , sa polarisation ϵ et son état quantique $|\psi(t)\rangle$ soient tels que la valeur moyenne de l'opérateur champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{0})$ soit égale à la valeur expérimentale $\mathbf{B}_1(\mathbf{0},t)$. Nous choisirons ici pour $|\psi(t)\rangle$ un état cohérent $|\alpha(t)\rangle$ (avec $\alpha \gg 1$) vérifiant

$$\langle \alpha(t) | \mathbf{B}(\mathbf{0}) | \alpha(t) \rangle = \mathbf{B}_1(\mathbf{0},t) \quad (28)$$

L'avantage de cette description du champ de radiofréquence est évidemment qu'elle ramène l'étude d'un problème de perturbation dépendant du temps à celle de l'évolution d'un système isolé (l'atome habillé), pour lequel il existe des grandeurs conservatives comme l'énergie, le moment cinétique, etc... facilitant les calculs et l'interprétation physique des résultats.

En l'absence d'interaction entre l'atome et le champ de radiofréquence, l'hamiltonien H_0 du système est la somme de l'hamiltonien atomique H_A et de celui H_R du mode du champ radiofréquence. L'effet des autres modes du champ de rayonnement est négligé, ainsi que l'énergie de point zéro du mode :

$$H_0 = H_A + H_R \quad (29)$$

$$H_A = -\mu \cdot \mathbf{B}_0 = \hbar \omega_0 S_z \quad (30)$$

$$H_R = \hbar \omega a^\dagger a \quad (31)$$

Si $| + \rangle$ et $| - \rangle$ sont les deux états propres de S_z , et $| N \rangle$ l'état à N photons du mode considéré, les états propres de H_0 sont $| \pm ,N \rangle$, d'énergies $E_{\pm,N}$

$$H_0 | \pm ,N \rangle = E_{\pm,N} | \pm ,N \rangle \quad (32)$$

$$E_{\pm,N} = \pm (\hbar\omega_0/2) + N\hbar\omega \quad (33)$$

En fonction de l'écart $\hbar\omega_0$ entre les niveaux atomiques, le diagramme d'énergie se présente sous la forme d'une infinité de droites de pentes $\pm \frac{1}{2}$ et d'ordonnées à l'origine $N\hbar\omega$ (fig. 3). Dans toute la suite, nous considérons des niveaux tels que $N \approx \langle N \rangle \gg 1$

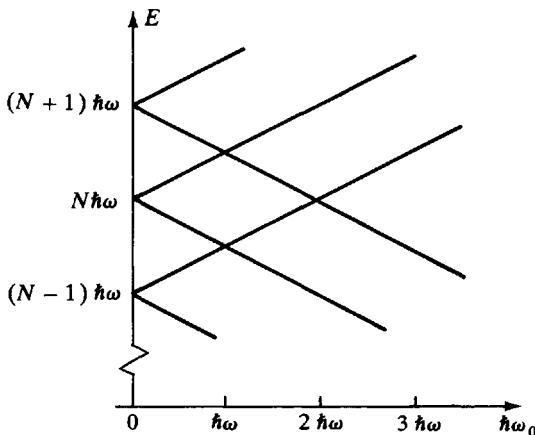


Fig. 3. Niveaux d'énergie non perturbés du système spin $\frac{1}{2}$ + photons de radiofréquence.

b) HAMILTONIEN D'INTERACTION ENTRE L'ATOME ET LE CHAMP DE RADIOFRÉQUENCE

L'hamiltonien d'interaction entre le moment magnétique porté par le spin et le champ magnétique du mode de polarisation ϵ est :

$$V = - \mu \cdot \mathbf{B}(0) \quad (34)$$

L'expression de $\mathbf{B}(0)$ découle de la formule (30) de l'appendice :

$$\mathbf{B}(0) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 c^2 L^3}} \left[a \frac{i(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})}{k} + a^+ \frac{(-i)(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}^*)}{k} \right] \quad (35)$$

Compte tenu de (26) et (35), l'expression (34) de V peut se mettre sous une forme simple

$$V = \lambda [(\mathbf{e} \cdot \mathbf{S})a + (\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{S})a^+] \quad (36)$$

où \mathbf{e} est le vecteur polarisation du champ magnétique et où λ joue le rôle de constante de couplage ayant la dimension d'une énergie.

Considérons de façon plus précise les éléments de matrice de V . Ils ne sont non nuls qu'entre des états $|\pm, N\rangle$ dont les valeurs de N diffèrent d'une unité :

$$\Delta N = \pm 1 \quad (37)$$

Les règles de sélection sur les valeurs propres m_s de S_z dépendent de la polarisation \mathbf{e} du champ magnétique de l'onde. Deux cas particuliers seront envisagés :

i) Polarisation circulaire

Les polarisations circulaires σ_+ et σ_- par rapport au champ magnétique statique \mathbf{B}_0 sont obtenues en choisissant pour vecteur polarisation \mathbf{e} :

$$\mathbf{e}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y) \quad (38)$$

Le couplage s'écrit alors :

$$V_{\sigma+} = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (aS_+ + a^+S_-) \quad (39.a)$$

et

$$V_{\sigma-} = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} (aS_- + a^+S_+) \quad (39.b)$$

Il est facile de vérifier que $V_{\sigma+}$ conserve le nombre quantique $m_s + N$. Cette règle de sélection résulte physiquement de la conservation du moment cinétique du système total dans la direction $0z$. Son interprétation est très simple : chaque photon du mode transporte une unité de moment angulaire le long de $0z$, de sorte que $(m_s + N)\hbar$ représente le moment cinétique total du système, qui est conservé. De façon analogue $V_{\sigma-}$ conserve $m_s - N$, chaque photon ayant un moment angulaire $-\hbar$.

ii) Polarisation linéaire

Une polarisation du champ radiofréquence linéaire et perpendiculaire à $0z$ est obtenue par exemple pour $\mathbf{e} = \mathbf{e}_x$. Nous appellerons σ une telle polarisation.

$$V_{\sigma} = \lambda S_x (a + a^+) \quad (40)$$

Remarquons que V_{σ} change N de ± 1 et m_s de ± 1 , donc $m_s + N$ de

0 ou ± 2 . Ceci montre que V_σ conserve le nombre quantique

$$\eta(m_s, N) = (-)^{m_s + N - \frac{1}{2}} \quad (41)$$

Ce dernier prend selon les niveaux les valeurs +1 ou -1.

Remarque

Dans les formules (39.a), (39.b), (40), les opérateurs a^+ et a sont les opérations de création et d'annihilation des photons des modes correspondants (σ_+ pour (39.a), σ_- pour (39.b), σ pour (40)). Ils sont notés avec les mêmes lettres pour ne pas alourdir les notations.

c) PRÉPARATION ET DÉTECTION

Différentes méthodes peuvent être utilisées pour préparer des atomes paramagnétiques dans un état de spin donné : la séparation des atomes d'un jet suivant leur état de spin par des gradients de champ magnétique est utilisable pour des états électroniques fondamentaux ou métastables. Le pompage optique peut être utilisé dans les mêmes conditions, ou pour les atomes contenus dans une cellule. Les états ainsi préparés ne sont pas nécessairement les états propres $|\pm\rangle$ de H_0 , mais peuvent être aussi des superpositions cohérentes de ceux-ci. C'est ce qui se passe par exemple si un pompage optique transversal (c'est-à-dire perpendiculaire au champ statique B_0) prépare les spins dans un état propre de S_x ou S_y . L'excitation optique en lumière polarisée circulairement permet de la même façon de préparer des états électroniques excités de moment cinétique $\frac{1}{2}$ dans un sous-niveau Zeeman donné ou dans une superposition de ces sous-niveaux. Enfin, l'équilibre de Boltzmann à basse température dans un champ magnétique élevé est caractérisé par des populations très inégales des deux sous-niveaux $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Des techniques d'impulsions radiofréquence permettent éventuellement de préparer ensuite des superpositions de ces états.

Pour fixer les idées, nous supposerons dans la suite que le système de préparation fournit des atomes dans l'état

$$|\varphi_a\rangle = |-\rangle \quad (42)$$

ou pour une excitation cohérente dans l'état

$$|\psi_i\rangle = [|+\rangle - |-\rangle]/\sqrt{2}, \quad (43)$$

état propre de S_x de valeur $-\frac{1}{2}$. L'état initial du système total est donc le produit tensoriel de ces états par l'état du champ radiofréquence à l'instant de la préparation, qui sera soit un état $|N\rangle$, soit un état cohérent $|\alpha(t)\rangle$.

Le triage magnétique et les méthodes optiques (par exemple, la mesure de l'absorption d'un faisceau lumineux polarisé circulairement) peuvent également être utilisés pour la détection. Les signaux obtenus sont proportionnels à la population d'un certain état que nous supposerons être

$$|\varphi_b\rangle = |+\rangle \quad (44)$$

ou, pour une détection cohérente

$$|\psi_f\rangle = [|+\rangle + |-\rangle]/\sqrt{2} \quad (45)$$

Pour l'atome habillé, il faudra sommer sur N les populations des états $|+,N\rangle$ ou $|\psi_f,N\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |N\rangle$.

Remarque

Nous supposons implicitement que les processus de préparation et de détection ne sont pas affectés par le couplage avec le champ de radiofréquence (ou bien qu'ils se font en dehors de la région de l'espace où ce dernier agit). Une telle condition implique que les temps de corrélation caractéristiques des processus de préparation et de détection soient plus courts que l'inverse des fréquences de Bohr pertinentes du système, ou que le temps d'entrée (et de sortie) des atomes dans la région d'interaction soit suffisamment court pour que l'approximation soudaine puisse être appliquée.

3. Le cas simple des photons de polarisation circulaire

Ce cas est particulièrement simple, car le diagramme d'énergie et les signaux de résonance peuvent être déterminés analytiquement.

a) LE DIAGRAMME D'ÉNERGIE

Le couplage $V_{\sigma+}$ n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre états propres de H_0 caractérisés par la même valeur de $m_s + N$. La diagonalisation de H peut donc être effectuée séparément à l'intérieur de chacun de ces sous-espaces. Comme m_s ne peut prendre que les valeurs $\pm \frac{1}{2}$, $m_s + N$ prend des valeurs demi-entières, et à chacune d'entre elles est associé un sous-espace de dimension deux. Ainsi, le sous-espace associé à la valeur $N + \frac{1}{2}$ est sous-tendu par les deux états :

$$|\varphi_a\rangle = |-,N+1\rangle ; \quad |\varphi_b\rangle = |+,N\rangle \quad (46)$$

dont les énergies non perturbées

$$E_a = (N + 1)\hbar\omega - (\hbar\omega_0/2) ; \quad E_b = N\hbar\omega + (\hbar\omega_0/2) \quad (47)$$

sont séparées par la fréquence de Bohr $\omega_{ab} = \omega - \omega_0$. Les éléments de

matrice de $V_{\sigma+}$ dans ce sous-espace sont donnés par :

$$\langle \varphi_a | V_{\sigma+} | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V_{\sigma+} | \varphi_b \rangle = 0 \quad (48.a)$$

$$\langle \varphi_b | V_{\sigma+} | \varphi_a \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sqrt{N+1} \quad (48.b)$$

Comme la dispersion des valeurs de N autour de $\langle N \rangle$ est très faible en valeur relative, nous pouvons approximer l'élément de matrice (48.b) par :

$$\langle \varphi_b | V_{\sigma+} | \varphi_a \rangle \approx \hbar \Omega_1 / 2 \quad (49)$$

où

$$\hbar \Omega_1 = \lambda \sqrt{2 \langle N \rangle} \quad (50)$$

Les états perturbés issus des états $|+,N\rangle$ et $|-,N+1\rangle$ forment donc un anticroisement simple du type étudié au paragraphe 1-a. Les niveaux d'énergie $E_1(N)$ et $E_2(N)$ sont deux hyperboles centrées en $\omega_0 = \omega$, dont les équations sont données par (3.a) et (3.b) avec les valeurs (47) de E_a et E_b .

$$\frac{1}{\hbar} E_1(N) = \left(N + \frac{1}{2} \right) \omega + \sqrt{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} \right)^2 + \left(\frac{\Omega_1}{2} \right)^2} \quad (51.a)$$

$$\frac{1}{\hbar} E_2(N) = \left(N + \frac{1}{2} \right) \omega - \sqrt{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} \right)^2 + \left(\frac{\Omega_1}{2} \right)^2} \quad (51.b)$$

Les états propres correspondants $|\chi_1(N)\rangle$ et $|\chi_2(N)\rangle$ s'expriment en fonction des états non perturbés (46) par les formules (5):

$$|\chi_1(N)\rangle = \sin \theta |-,N+1\rangle + \cos \theta |+,N\rangle \quad (52.a)$$

$$|\chi_2(N)\rangle = \cos \theta |-,N+1\rangle - \sin \theta |+,N\rangle \quad (52.b)$$

$$\cotg 2\theta = -\frac{\omega - \omega_0}{\Omega_1}; \quad 0 \leq 2\theta < \pi \quad (53)$$

Les niveaux d'énergie sont tracés sur la figure 4. Ils sont formés d'un ensemble d'hyperboles admettant les niveaux non perturbés de la figure 3 comme asymptotes et dont la distance entre sommets est directement $\hbar \Omega_1$.

Considérons à présent les autres points de croisement du diagramme des niveaux d'énergie non perturbés. En présence du couplage V , ces croisements ne se transforment pas en anticroisements. En effet, les niveaux qui se croisent en ces points appartiennent à des sous-espaces correspondant à des valeurs différentes de $N + m_s$ et ils ne sont donc couplés par V à aucun ordre.

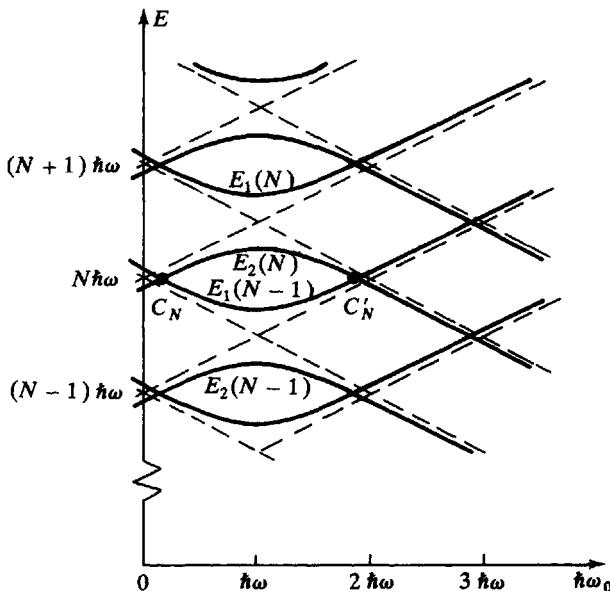


Fig. 4. Variations avec $\hbar\omega_0$ des niveaux d'énergie d'un spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence de polarisation circulaire.

b) LA RÉSONANCE MAGNÉTIQUE INTERPRÉTÉE COMME UNE RÉSONANCE D'ANTICROISEMENT DE L'ATOME HABILLÉ

L'étude du paragraphe 1-a permet d'associer à chacun des anticroisements de la figure 4 un transfert de population entre les états non perturbés $|\varphi_a\rangle = |-, N+1\rangle$ et $|\varphi_b\rangle = |+, N\rangle$. Cette transition entre états de l'atome habillé s'interprète comme le basculement du spin de l'état $|-\rangle$ à l'état $|+\rangle$ avec absorption d'un photon radiofréquence. Ce transfert est résonnant en $\omega_{ab} = 0$, soit $\omega = \omega_0$. Si les atomes sont préparés en régime permanent dans l'état $|-\rangle$ en présence de $N+1$ photons, la population de l'état $|+, N\rangle$ est donnée par la formule (11.b) :

$$\bar{P}(+, N; -, N+1) = \frac{1}{2} \frac{\Omega_1^2}{\Gamma^2 + \Omega_1^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (54)$$

Dans cette expression, nous avons supposé $N \approx \langle N \rangle$, et fait l'approximation (49). En réalité, comme la préparation n'est pas faite avec une valeur de N bien déterminée et que l'observation porte seulement sur l'état du spin, il faut prendre la moyenne sur les différentes valeurs initiales de N , avec le poids $|\langle N | \alpha \rangle|^2$, et, pour chaque valeur de N , sommer sur les valeurs finales possibles N' du nombre de photons.

Comme l'état $| -,N+1 \rangle$ n'est couplé qu'à l'état $| +,N \rangle$, la somme sur N' ne comprend que le terme (54). Il vient donc :

$$\bar{P}_{+-} = \sum_N |\langle N | \alpha \rangle|^2 \bar{P}(+,N; -,N+1) \quad (55)$$

Comme $|\langle N | \alpha \rangle|^2$ n'a de valeurs notables que pour $N \approx \langle N \rangle = |\alpha|^2$, l'approximation (49) faite dans l'expression de $\bar{P}(+,N; -,N+1)$ est valable. Cette dernière quantité, indépendante de N peut être sortie de la somme sur N , qui vaut alors 1 par suite de la normalisation de $|\alpha\rangle$. On a finalement :

$$\bar{P}_{+-} = \frac{1}{2} \frac{\Omega_1^2}{\Gamma^2 + \Omega_1^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (56)$$

La probabilité de transition moyenne \bar{P}_{+-} varie avec $\omega_0 - \omega$ comme une courbe de résonance, centrée en $\omega_0 = \omega$, de largeur $2[\Gamma^2 + \Omega_1^2]^{1/2}$, et dont la hauteur tend vers $\frac{1}{2}$ quand Ω_1/Γ tend vers l'infini.

Remarque

Si le champ de radiofréquence est décrit par l'état $|\alpha(t)\rangle$, la matrice densité décrivant un système préparé à l'instant t est :

$$\begin{aligned} \sigma_{ex}(t) &= | + \rangle \langle + | \otimes |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)| \\ &= \sum_{N,N'} | +,N \rangle \langle N | \alpha(t) \rangle \langle \alpha(t) | N' \rangle \langle +,N' |, \end{aligned} \quad (57)$$

soit encore, en approximant l'évolution du champ entre 0 et t par celle d'un champ libre (la réaction des spins sur le champ est supposé négligeable) :

$$\begin{aligned} \sigma_{ex}(t) &= \sum_{N,N'} [\langle N | \alpha(0) \rangle \langle \alpha(0) | N' \rangle \times \\ &\quad \times e^{-i(N-N')\omega t}] | +,N \rangle \langle +,N' | \end{aligned} \quad (58)$$

Ainsi, le terme source de l'équation pilote décrivant l'évolution de l'ensemble des spins en interaction avec le champ contient des termes modulés aux fréquences $(N - N')\omega$. Ces termes donnent lieu à des signaux résonnantes, détectables pour $N - N' = \pm 1$. Nous nous intéressons ici uniquement aux signaux statiques, pour lesquels il suffit de considérer le terme indépendant du temps de (58) :

$$\sigma_{ex}^{(stat)} = \sum_N |\langle N | \alpha(0) \rangle|^2 | +,N \rangle \langle +,N | \quad (59)$$

Cette distribution d'états $| +,N \rangle$ avec les poids $|\langle N | \alpha(0) \rangle|^2$ est précisément celle que nous avons considérée pour calculer (56).

c) RÉSONANCES DE CROISEMENT DES NIVEAUX HABILLÉS

En l'absence de champ de radiofréquence, les deux niveaux d'énergie du spin dans le champ magnétique se croisent en $\omega_0 = 0$. Une résonance de croisement peut être observée sur des spins préparés et détectés dans les états $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ donnés par (43) et (45). La correspondance $|a\rangle = |-\rangle$, $|b\rangle = |+\rangle$ permet d'appliquer la formule (25) avec $\lambda_a = -1/\sqrt{2}$, $\lambda_b = \mu_a = \mu_b = 1/\sqrt{2}$, $\omega_{ab} = -\omega_0$, ce qui donne la forme de la résonance de croisement (*):

$$\begin{aligned}\bar{P}_{fi} &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \left[\frac{\Gamma}{\Gamma - i\omega_0} + c.c. \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{\omega_0^2}{\Gamma^2 + \omega_0^2}\end{aligned}\quad (60)$$

En présence du champ de radiofréquence, mais en l'absence d'interaction, les énergies des niveaux $|+,N\rangle$ et $|-,N\rangle$ se coupent en $\omega_0 = 0$. En présence d'interaction, les droites de la figure 3 deviennent les hyperboles de la figure 4, qui ne se coupent plus en $\omega_0 = 0$. De façon précise, l'écart d'énergie entre les états $E_1(N-1)$ et $E_2(N)$ vaut d'après (51) :

$$\hbar\tilde{\omega}_{ab} = E_1(N-1) - E_2(N) = \hbar[\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \Omega_1^2} - \omega] \quad (61)$$

Il s'annule en

$$\omega_0 = \omega - \sqrt{\omega^2 - \Omega_1^2} \quad (62)$$

L'interaction déplace donc le point de croisement. Pour de faibles valeurs de Ω_1 , il se trouve en $\omega_0 \approx \Omega_1^2/2\omega$ et se rapproche de $\omega_0 = \omega$ lorsque Ω_1 augmente. Il disparaît pour $\Omega_1 \geq \omega$.

Pour déterminer analytiquement l'expression de la résonance de croisement, exprimons les états non perturbés en fonction des états propres de l'atome habillé en inversant les formules (52) :

$$| -,N\rangle = \sin \theta |\chi_1(N-1)\rangle + \cos \theta |\chi_2(N-1)\rangle \quad (63.a)$$

$$| +,N\rangle = \cos \theta |\chi_1(N)\rangle - \sin \theta |\chi_2(N)\rangle \quad (63.b)$$

(*) Cette résonance de croisement en champ magnétique nul correspond à l'effet Hanle (voir W. Hanle, Z. f. Phys. 30, 93 (1924) et aussi Brossel).

Les états préparés et détectés sont respectivement :

$$\begin{aligned} |\psi_i, N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) \otimes |N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \cos \theta |\chi_1(N)\rangle - \sin \theta |\chi_2(N)\rangle - \\ &\quad - \sin \theta |\chi_1(N-1)\rangle - \cos \theta |\chi_2(N-1)\rangle \} \end{aligned} \quad (64.a)$$

$$\begin{aligned} |\psi_f, N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \otimes |N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \cos \theta |\chi_1(N)\rangle - \sin \theta |\chi_2(N)\rangle + \\ &\quad + \sin \theta |\chi_1(N-1)\rangle + \cos \theta |\chi_2(N-1)\rangle \} \end{aligned} \quad (64.b)$$

Pour appliquer la formule (25), il faut considérer les composantes de $|\psi_i, N\rangle$ et $|\psi_f, N\rangle$ sur les niveaux qui se croisent, en l'occurrence $|\chi_1(N-1)\rangle$ et $|\chi_2(N)\rangle$. Elles valent $-\sin \theta / \sqrt{2}$, $-\sin \theta / \sqrt{2}$, $+\sin \theta / \sqrt{2}$, $-\sin \theta / \sqrt{2}$, ce qui conduit, après sommation sur N , à :

$$\bar{P}_{fi} = \frac{\sin^4 \theta}{2} \frac{\tilde{\omega}_{ab}^2}{\Gamma^2 + \tilde{\omega}_{ab}^2} \quad (65)$$

où θ est donné par (53) et $\tilde{\omega}_{ab}$ par (61). A la limite des faibles valeurs de Ω_1 , le croisement reste au voisinage de $\omega_0 = 0$, et $\sin \theta \approx 1$. Le champ de radiofréquence circulaire agit alors comme un champ effectif statique parallèle à $0z$ qui déplace la position du croisement de niveaux d'une quantité égale à $\Omega_1^2/2\omega$.

Le diagramme d'énergie de la figure 4 présente de nombreux autres croisements. Toutefois, un petit nombre d'entre eux peuvent être observés sur les signaux de détection. En effet, les états préparés et détectés ne se décomposent que sur les quatre états propres de l'atome habillé figurant dans les développements (64.a) et (64.b). Seuls les points de croisement entre les niveaux d'énergie correspondants sont observables sur les signaux de détection. Ils sont au nombre de deux seulement et correspondent aux points d'intersection de $E_2(N)$ et $E_1(N-1)$ appelés C_N et C'_N sur la figure 4. L'un des deux est celui que nous venons d'étudier. Le second se situe à $\omega_0 = 2\omega$ à la limite des couplages faibles, et se rapproche de $\omega_0 = \omega$ à forte intensité. L'expression de la résonance correspondante est toujours donnée par la formule (65), mais pour les valeurs de ω_0 voisines du point de croisement donné par la deuxième solution de $\tilde{\omega}_{ab} = 0$, soit, d'après (61) :

$$\omega_0 = \omega + \sqrt{\omega^2 - \Omega_1^2} \quad (66)$$

A la limite perturbative et au voisinage de $\omega_0 = 2\omega$, les formules (61) et (53) donnent $\tilde{\omega}_{ab} = [\omega_0 - (2\omega - \frac{\Omega_1^2}{2\omega})]$, et $\cot 2\theta = \omega/\Omega_1$, soit $2\theta = \Omega_1/\omega$. La résonance se présente sous la forme

$$\bar{P}_{fi}(2\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{\Omega_1}{2\omega} \right)^4 \left\{ 1 - \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + [\omega_0 - (2\omega - \frac{\Omega_1^2}{2\omega})]^2} \right\} \quad (67)$$

Elle n'est observable qu'en présence du couplage avec la radiofréquence qui, en contaminant les états $| -,N+1\rangle$ par $| +,N\rangle$ et $| +,N-1\rangle$ par $| -,N\rangle$, permet l'excitation et la détection cohérente des deux niveaux qui se croisent.

4. Photons de radiofréquence de polarisation linéaire

Le diagramme d'énergie d'un spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence σ_+ (ou σ_-) ne fait apparaître qu'une résonance d'anticroisement et deux résonances de croisement. Nous allons considérer maintenant le cas où les photons de radiofréquence ont une polarisation linéaire, perpendiculaire au champ magnétique (polarisation σ), et montrer qu'une telle situation est beaucoup plus riche en phénomènes physiques.

a) PRÉSENTATION DES EFFETS NOUVEAUX

Comme $S_x = (S_+ + S_-)/2$, l'hamiltonien d'interaction (40) peut s'écrire sous la forme :

$$V_\sigma = V_+ + V_- \quad (68)$$

où

$$V_+ = \frac{\lambda}{2} (S_+ a + S_- a^\dagger) \quad (69.a)$$

$$V_- = \frac{\lambda}{2} (S_- a + S_+ a^\dagger) \quad (69.b)$$

V_+ couple le niveau $| +,N\rangle$ au niveau $| -,N+1\rangle$ ce qui fait apparaître un anticroisement en $\omega_0 = \omega$ comme dans le paragraphe précédent. V_- couple $| +,N\rangle$ à $| -,N-1\rangle$ et donne naissance à un anticroisement en $\omega_0 = -\omega$. Les éléments de matrice correspondants sont :

$$\begin{aligned} \langle +,N | V_\sigma | -,N+1 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \sqrt{N+1} \\ \langle +,N | V_\sigma | -,N-1 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \sqrt{N} \end{aligned} \quad (70)$$

et peuvent être approximés par

$$\langle +,N | V_\sigma | -,N \pm 1 \rangle = \frac{\hbar \Omega_1}{2} \quad (71)$$

avec (*)

$$\hbar \Omega_1 = \lambda \sqrt{\langle N \rangle} \quad (72)$$

A l'ordre le plus bas en Ω_1 , le diagramme d'énergie comprend ainsi des anticroisements en $\omega_0 = \pm \omega$, auxquels sont associées deux résonances symétriques par rapport à $\omega_0 = 0$.

Aux ordres supérieurs, il faut considérer, outre les effets de saturation produits séparément par V_+ et V_- , les effets croisés entre ces deux termes. Ainsi, l'anticroisement créé par V_- au voisinage de $\omega_0 = -\omega$ déplace les niveaux qui sont couplés de façon résonnante par V_+ en $\omega_0 = \omega$. Ce dernier anticroisement est alors déplacé, ainsi que la résonance magnétique associée : c'est le déplacement de Bloch-Siegert que nous calculerons au paragraphe b.

De plus, des niveaux qui, pour un couplage V_+ (ou V_-) pur appartiendraient à des sous-espaces non connectés par V_+ (ou V_-), sont maintenant couplés à des ordres supérieurs. Ainsi, l'état $|+,N\rangle$ est couplé à l'ordre 1 à $|-,N \pm 1\rangle$, à l'ordre 2 à $|+,N \pm 2\rangle$ et $|+,N\rangle$, etc... De façon générale, $|+,N\rangle$ est couplé à tous les états $|-,N \pm (2p+1)\rangle$ et $|+,N \pm 2p\rangle$ où p est un entier quelconque. Les états non perturbés peuvent donc être regroupés en deux sous-espaces qui ne sont pas connectés par V_σ . Ces deux sous-espaces correspondent d'ailleurs aux valeurs +1 et -1 du nombre quantique $\eta(m_s, N)$ conservé par V_σ et donné en (41). Les croisements entre niveaux d'un même sous-espace sont transformés en anticroisements par V_σ . C'est le cas des états $|+,N\rangle$ et $|-,N+(2p+1)\rangle$ qui se croisent en $\omega_0 = (2p+1)\omega$. Au contraire, les intersections entre niveaux de sous-espaces différents restent des croisements. Ainsi en est-il pour les états $|+,N\rangle$ et $|-,N+2p\rangle$ qui se coupent en $\omega_0 = 2p\omega$. Le diagramme d'énergie de l'atome habillé présente donc un spectre impair d'anticroisements et un spectre pair de croisements, auxquels sont associées des résonances qui seront étudiées dans les paragraphes c et d. Comme les résonances $\omega_0 = \pm \omega$, toutes ces résonances subissent des déplacements radiatifs.

(*) Avec cette définition, Ω_1 représente, comme dans le chapitre, la fréquence de Rabi pour la résonance à un photon ($\omega_0 = \pm \omega$). Il faut noter que la plupart des articles originaux utilisent, pour un champ de radiofréquence de polarisation linéaire $B_1 \cos \omega t \mathbf{e}_x$, un autre paramètre $\omega_1 = -\gamma B_1$. La relation entre ces deux paramètres peut être obtenue par décomposition du champ linéaire en deux champs circulaires droit et gauche et s'écrit $\omega_1 = 2 \Omega_1$.

Par suite de l'invariance de V_σ et H_R par renversement du sens du temps et du caractère impair de H_A dans cette opération, les niveaux d'énergie sont symétriques par rapport à $\omega_0 = 0$. Il en résulte que les croisements en champ nul ne sont pas déplacés (*). Lorsque l'intensité du champ varie, la pente des niveaux d'énergie en champ nul, qui représente le facteur de Landé de l'atome habillé, varie également. Cette variation peut être déterminée exactement pour toute valeur de Ω_1/ω , comme nous le montrerons au paragraphe e.

b) LE DÉPLACEMENT DE BLOCH-SIEGERT

Considérons les niveaux $|\varphi_a\rangle = |-, N+1\rangle$ et $|\varphi_b\rangle = |+, N\rangle$ entre lesquels se produisent les transitions caractéristiques de la résonance magnétique au voisinage de $\omega_0 = \omega$, et utilisons les résultats du paragraphe 1-b. Les éléments de matrice de l'opérateur $R(E_0)$ pris pour

$$E_0 = \frac{E_a + E_b}{2} = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (73)$$

seront déterminés à l'ordre le plus bas où ils sont non nuls. L'élément non diagonal ne comprend d'ailleurs qu'un seul terme d'ordre 1, qui, d'après (71) vaut :

$$R_{ab}(E_0) = \langle -, N+1 | V_\sigma | +, N \rangle = \frac{\hbar\Omega_1}{2} \quad (74)$$

Pour les éléments de matrice diagonaux, le terme d'ordre 1 est nul et il faut considérer le terme d'ordre 2. Par exemple :

$$R_{aa}(E_0) = \sum_{c \neq a,b} \frac{|\langle \varphi_a | V_\sigma | \varphi_c \rangle|^2}{E_0 - E_c} \quad (75)$$

Le seul état intermédiaire non résonnant qui contribue est l'état $|+, N+2\rangle$. En utilisant (73), (33) et en approximant ω_0 par ω , on obtient

$$\begin{aligned} R_{aa}(E_0) &= \frac{|\langle -, N+1 | V_\sigma | +, N+2 \rangle|^2}{\left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \left[\frac{\hbar\omega_0}{2} + (N+2) \hbar\omega \right]} \\ &\approx -\frac{\hbar\Omega_1^2}{8\omega} \end{aligned} \quad (76)$$

(*) Le fait que les niveaux d'énergie soient deux fois dégénérés en champ nul est d'ailleurs une conséquence du théorème de Kramers ; voir Messiah, ch. XV.

De la même façon

$$R_{bb}(E_0) = \frac{\hbar\Omega_1^2}{8\omega} \quad (77)$$

Ainsi l'anticroisement est déplacé, d'après (16), de la quantité

$$\delta\omega_0 = -\delta\omega_{ab} = -\frac{\Omega_1^2}{4\omega} \quad (78)$$

qui est le « déplacement de Bloch-Siegert » (*). La résonance magnétique se produit dans un champ plus faible. Il apparaît clairement dans le calcul précédent qu'un tel effet est dû aux couplages non résonnantes induits par V_σ . Ces couplages disparaissent lorsqu'on fait, comme dans le chapitre (§ B-3-b), l'approximation du champ tournant. Un calcul analogue montre que le déplacement de la résonance $\omega_0 = -\omega$ est l'opposé de (78), de sorte que les deux résonances se rapprochent du champ nul.

Remarque

Nous avons calculé le déplacement de Bloch-Siegert à l'ordre le plus bas en Ω_1/ω . Pour déterminer les termes d'ordre supérieur, il faut considérer les termes suivants du développement de $R(z)$ et ne pas faire l'approximation consistant à remplacer z par E_0 . Les énergies $E_1(N)$ et $E_2(N)$ sont déterminées comme solutions d'une équation implicite donnant les pôles de $G(z)$. Le centre de l'anticroisement, défini comme le point où les niveaux d'énergie ont une tangente horizontale, peut alors être exprimé sous forme d'un développement en puissances de Ω_1/ω (**).

c) LE SPECTRE IMPAIR DE RÉSONANCES D'ANTICROISEMENT

Considérons deux niveaux non perturbés se croisant en $\omega_0 = (2p+1)\omega$, par exemple $|\varphi_a\rangle = |-,N+1\rangle$ et $|\varphi_b\rangle = |+,N-2p\rangle$, et appliquons à nouveau les résultats du paragraphe 1-b. Le déplacement $R_{aa}(E_0)$ du niveau $|\varphi_a\rangle$ est produit par son couplage avec les niveaux $|+,N\rangle$ et $|+,N+2\rangle$, les éléments de matrice correspondants valant $\hbar\Omega_1/2$. L'énergie moyenne E_0 vaut

$$E_0 = \frac{E_a + E_b}{2} = \left(N - p + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (79)$$

de sorte qu'en approximant ω_0 par $(2p+1)\omega$, les dénominateurs

(*) Voir par exemple Abragam (chapitre II).

(**) Voir par exemple : C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et C. Fabre, J. Phys. B 6, L214 (1973).

d'énergies relatifs aux états $|+,N\rangle$ et $|+,N+2\rangle$ sont respectivement : $(N-p+\frac{1}{2})\hbar\omega - [(\hbar\omega_0/2) + N\hbar\omega] \approx -2p\hbar\omega$ et $(N-p+\frac{1}{2})\hbar\omega - [(\hbar\omega_0/2) + (N+2)\hbar\omega] \approx -(2p+2)\hbar\omega$. Finalement

$$\begin{aligned} R_{aa}(E_0) &= -\left(\frac{\hbar\Omega_1}{2}\right)^2 \left[\frac{1}{2p\hbar\omega} + \frac{1}{(2p+2)\hbar\omega} \right] \\ &= -\frac{\Omega_1^2}{8\omega} \frac{2p+1}{p(p+1)} \end{aligned} \quad (80)$$

Le déplacement du niveau $|\varphi_b\rangle$ est l'opposé de (80), ce qui d'après (16) conduit à un déplacement du centre de la résonance

$$\delta\omega_0 = -\frac{\hbar\Omega_1^2}{4\omega} \frac{2p+1}{p(p+1)} \quad (81)$$

Déterminons maintenant l'élément non diagonal $R_{ab}(E_0)$ qui produit l'anticroisement. Comme les états $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$ diffèrent de $2p+1$ photons, le premier terme non nul du développement de $R_{ab}(E_0)$ est d'ordre $2p+1$:

$$\begin{aligned} R_{ab}(E_0) &= \frac{\langle -,N+1|V_\sigma|+,N\rangle\langle +,N|V_\sigma|-,N-1\rangle\dots}{(E_0-E_{+,N})(E_0-E_{-,N-1})\dots} \times \\ &\quad \times \frac{\dots\langle -,N-2p+1|V_\sigma|+,N-2p\rangle}{\dots(E_0-E_{-,N-2p+1})} + \dots \end{aligned} \quad (82)$$

et vaut, tout calcul fait

$$R_{ab}(E_0) = \frac{(-)^p \hbar \Omega_1^{2p+1}}{\omega^{2p} 2^{4p+1} (p!)^2} + \dots \quad (83)$$

A l'anticroisement est associé un transfert résonnant entre les états $|\varphi_a\rangle$ et $|\varphi_b\rangle$. Lorsque la résonance n'est pas saturée, c'est-à-dire pour $|R_{ab}| \ll [\omega_{ab}^2 + \Gamma^2]^{\frac{1}{2}}$, son intensité est proportionnelle à R_{ab}^2 , donc à Ω_1^{4p+2} . Son déplacement par rapport à $\omega_0 = (2p+1)\omega$ est donné par (81). Notons que le déplacement en Ω_1^2 croît plus vite que l'intensité en Ω_1^{4p+2} de sorte que lorsque les résonances sont notables, elles sont déjà considérablement déplacées.

Revenons sur l'interprétation physique des résonances impaires. Ce sont des transitions multiphotoniques, comme le montre clairement la comparaison de l'état initial $|\varphi_a\rangle$ et de l'état final $|\varphi_b\rangle$ du système. De façon plus précise, le numérateur de (82) est un produit d'éléments de matrice de V_σ qui, de gauche à droite, font diminuer à chaque état intermédiaire le nombre de photons d'une unité, le spin passant alternativement vers l'état $|+\rangle$ ou $|-\rangle$. Les photons σ sont des

superpositions linéaires de photons σ_+ et σ_- . A cause de la conservation du moment angulaire le long de $0z$, la transition de l'état $| -, N+1 \rangle$ vers l'état $| +, N-2p \rangle$ est réalisée par absorption successive d'un photon σ_+ , puis d'un photon σ_- , etc..., soit au total $p+1$ photons σ_+ et p photons σ_- . Pour la même raison, une transition à $2p$ photons entre les états $| - \rangle$ et $| + \rangle$ est interdite en polarisation σ , car le moment cinétique atomique ne pourrait pas avoir changé d'une unité de \hbar à l'issue de ce processus. Une telle transition serait par contre autorisée si la polarisation du champ n'était plus perpendiculaire à $0z$, les trois types de photons σ_+ , σ_- et π étant alors présents.

d) LE SPECTRE PAIR DE RÉSONANCES DE CROISEMENT

Les niveaux $| +, N \rangle$ et $| -, N+2p \rangle$ se coupent en $\omega_0 = 2p\omega$. En présence du couplage, les niveaux perturbés continuent à se croiser, mais sont déplacés. Le calcul des éléments de matrice diagonaux de $R(E_0)$ est analogue à ceux du paragraphe précédent. Le résultat est identique, au changement près de $2p+1$ en $2p$, ce qui donne pour le déplacement du croisement

$$\delta\omega_0 = -\frac{\Omega_1^2}{4\omega} \frac{2p}{(p-\frac{1}{2})(p+\frac{1}{2})} \quad (84)$$

Comme dans le cas étudié au paragraphe 3-c, la résonance de croisement n'est observable que dans la mesure où les états perturbés $| +, N \rangle$ et $| -, N+2p \rangle$ contiennent des états $| +, N' \rangle$ et $| -, N' \rangle$ avec le même nombre de photons. Les états initial et final $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ sont en effet des combinaisons linéaires de $| +, N' \rangle$ et $| -, N' \rangle$. Or les amplitudes $\langle \psi_i, N' | +, N \rangle$, $\langle \psi_f, N' | +, N \rangle$ et $\langle \psi_i, N' | -, N+2p \rangle$, $\langle \psi_f, N' | -, N+2p \rangle$ sont respectivement d'ordre $(\Omega_1/\omega)^{|N-N'|}$ et $(\Omega_1/\omega)^{|N+2p-N'|}$. Il s'ensuit que la résonance de croisement est excitée à l'ordre le plus bas pour $N \leq N' \leq N+2p$, et que son intensité est d'ordre

$$\left[\left(\frac{\Omega_1}{\omega} \right)^{N'-N} \times \left(\frac{\Omega_1}{\omega} \right)^{N+2p-N'} \right]^2 = \left(\frac{\Omega_1}{\omega} \right)^{4p} \quad (85)$$

Ces résonances de croisement sont intéressantes dans la mesure où elles ne subissent pas d'élargissement radiatif et où leur déplacement radiatif est mesurable jusqu'à des valeurs de Ω_1 de l'ordre de ω . L'approximation quadratique (84) est alors insuffisante, et les termes d'ordre supérieur doivent être pris en compte (*).

(*) Voir par exemple C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et C. Fabre, J. Phys. B 6, L.218 (1973).

e) UN CALCUL NON PERTURBATIF: LE FACTEUR DE LANDÉ DE L'ATOME HABILLÉ

Jusqu'ici, nous avons adopté une approche perturbative. L'hamiltonien de l'atome habillé par des photons σ ne peut pas en effet être diagonalisé explicitement, sauf en un point, $\omega_0 = 0$. Il vaut alors :

$$H(\omega_0 = 0) = \hbar\omega a^+ a + \lambda S_x(a + a^+) \quad (86)$$

Dans cette expression, S_x est le seul opérateur atomique. H commute donc avec S_x et sa diagonalisation se ramène à celle de sa restriction H_ϵ à chacun des deux sous-espaces propres de S_x , soit

$$\begin{aligned} H_\epsilon &= \hbar\omega a^+ a + \frac{\epsilon}{2} \lambda(a + a^+) \\ &= \hbar\omega \left(a^+ + \frac{\epsilon\lambda}{2\hbar\omega} \right) \left(a + \frac{\epsilon\lambda}{2\hbar\omega} \right) - \frac{\lambda^2}{4\hbar\omega} \end{aligned} \quad (87)$$

où $\epsilon = \pm 1$. L'application à H_ϵ de l'opérateur translation $\exp[\epsilon\lambda(a^+ - a)/2\hbar\omega]$ (voir appendice, formule (66)) le ramène à $\hbar\omega a^+ a - (\lambda^2/4\hbar\omega)$, dont la diagonalisation est immédiate, ses valeurs propres étant

$$E_N = N\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{4\hbar\omega} \quad (88)$$

Finalement, les états propres de H correspondant à la valeur propre E_N sont :

$$|\widetilde{\epsilon_x, N}\rangle = \exp[-\epsilon\lambda(a^+ - a)/2\hbar\omega] |\epsilon_x\rangle |N\rangle \quad (89)$$

(les états $|-\rangle$ et $|+\rangle$ sont donnés respectivement par (43) et (45) en fonction des états propres $|\pm\rangle$ de S_z).

L'effet Zeeman de l'atome habillé correspond à la levée de la dégénérescence des états $|\pm_x, N\rangle$ par l'hamiltonien Zeeman

$$H_z = \hbar\omega_0 S_z \quad (90)$$

À la limite des faibles champs magnétiques ($\omega_0 \ll \omega$), la théorie des perturbations à l'ordre 1 en H_z permet de déterminer le terme linéaire en ω_0 , donc le rapport du facteur de Landé de l'atome habillé à celui de l'atome isolé. En utilisant les éléments de matrice de S_z dans la base $|\epsilon_x\rangle$

$$\langle \epsilon_x | S_z | \epsilon_x \rangle = 0 ; \quad \langle +_x | S_z | -_x \rangle = \frac{1}{2} \quad (91)$$

on trouve que, dans le sous-espace $|\widetilde{\pm_x, N}\rangle$, H_z est représenté par une

matrice 2×2 dont les éléments de matrice sont

$$\begin{aligned}\langle \widetilde{\epsilon_x, N} | H_z | \widetilde{\epsilon_x, N} \rangle &= 0 \\ \langle \widetilde{+}, N | H_z | \widetilde{-}, N \rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{2} \langle N | \exp \left(\frac{\lambda}{\hbar\omega} (a^+ - a) \right) | N \rangle\end{aligned}\quad (92)$$

Le facteur $\langle N | \exp [\lambda(a^+ - a)/\hbar\omega] | N \rangle$ peut être calculé explicitement (voir la remarque ci-dessous). A la limite où $N \approx \bar{N} \gg 1$, il s'exprime en fonction de la fonction de Bessel d'ordre 0, J_0 :

$$\langle N | \exp [\lambda(a^+ - a)/\hbar\omega] | N \rangle \approx J_0(2\Omega_1/\omega) \quad (93)$$

Ainsi la fréquence de Larmor ω_0 de l'atome libre est, pour l'atome habillé, multipliée par $J_0(2\Omega_1/\omega)$. Cette fonction décroît à partir de la valeur 1, s'annule, change de signe pour $2\Omega_1/\omega = 2,40$ puis continue d'osciller en décroissant lentement. Le facteur de Landé de l'atome habillé peut donc être notablement différent de celui de l'atome libre.

Remarque ()*

Evaluons l'élément de matrice (93) pour $N = \langle N \rangle \gg 1$. En utilisant la formule de Glauber, on peut le mettre sous la forme

$$\begin{aligned}\langle N | \exp \left[\frac{\lambda}{\hbar\omega} (a^+ - a) \right] | N \rangle &= \\ \left[\exp \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \langle N | \exp \left(\frac{\lambda a^+}{\hbar\omega} \right) \exp \left(\frac{-\lambda a}{\hbar\omega} \right) | N \rangle\end{aligned}\quad (94)$$

Comme $\lambda/\hbar\omega \ll 1$, le premier facteur vaut 1. Le second fait intervenir le vecteur

$$\exp \left(\frac{-\lambda a}{\hbar\omega} \right) | N \rangle = \sum_{p=0}^N \frac{1}{p!} \left(\frac{-\lambda}{\hbar\omega} \right)^p a^p | N \rangle \quad (95)$$

Les valeurs de p qui contribuent principalement à (95) sont de l'ordre de

$$p \approx \frac{\lambda \sqrt{N}}{\hbar\omega} \approx \frac{\Omega_1}{\omega} \ll N \quad (96)$$

Dans le calcul de $a^p | N \rangle$, on peut donc assimiler $N - p$ à N , donc à $\langle N \rangle$. Ceci conduit à utiliser l'approximation :

$$a^p | N \rangle \approx \sqrt{\langle N \rangle^p} | N - p \rangle \quad (97)$$

Il vient alors

$$\exp \left(\frac{-\lambda a}{\hbar\omega} \right) | N \rangle = \sum_{p=0}^N \frac{1}{p!} \left(\frac{-\lambda \sqrt{\langle N \rangle}}{\hbar\omega} \right)^p | N - p \rangle \quad (98)$$

(*) Voir N. Polonsky et C. Cohen-Tannoudji, J. Physique, 26, 409 (1965).

De la même façon

$$\langle N | \exp \left(\frac{\lambda a^+}{\hbar \omega} \right) = \sum_{p=0}^N \frac{1}{p!} \left(\frac{\lambda \sqrt{\langle N \rangle}}{\hbar \omega} \right)^p \langle N - p | \quad (99)$$

et

$$\langle N | \exp \left[\frac{\lambda}{\hbar \omega} (a^+ - a) \right] | N \rangle = \sum_{p=0}^N \frac{(-)^p}{(p!)^2} \left(\frac{\lambda \sqrt{\langle N \rangle}}{\hbar \omega} \right)^{2p} \quad (100)$$

La somme apparaissant dans (100) n'est autre que le développement en série de la fonction de Bessel J_0 , de sorte que

$$\langle N | \exp \left[\frac{\lambda}{\hbar \omega} (a^+ - a) \right] | N \rangle = J_0 \left(\frac{2\lambda \sqrt{\langle N \rangle}}{\hbar \omega} \right) = J_0 \left(\frac{2\Omega_1}{\omega} \right) \quad (101)$$

f) ÉVOLUTION QUALITATIVE DU DIAGRAMME D'ÉNERGIE AUX FORTES INTENSITÉS

Tous les résultats que nous venons de discuter dans ce paragraphe 4 apparaissent clairement sur le diagramme d'énergie du spin habillé représenté sur la figure 5. Sur cette figure, tracée pour $\Omega_1 < \omega$, on distingue les anticroisements au voisinage de $\omega_0 = \omega, 3\omega, \dots$, les croisements en $\omega_0 = 0, 2\omega, \dots$. Les déplacements radiatifs sont égale-

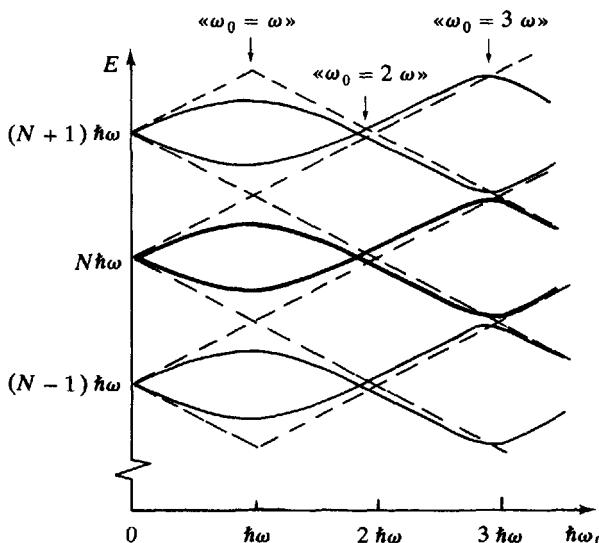


Fig. 5. Niveaux d'énergie d'un spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence de polarisation σ .

ment visibles de même que la diminution de la pente des niveaux en champ nul.

Lorsque Ω_1 augmente, les anticroisements « $\omega_0 = \pm \omega$ » et les croisements « $\omega_0 = \pm 2\omega$ » arrivent en $\omega_0 = 0$, en même temps que s'annule la pente des niveaux à l'origine, c'est-à-dire pour $2\Omega_1/\omega = 2,40\dots$. Si Ω_1 augmente encore, le facteur de Landé s'inverse, et, à leur tour, la résonance à trois quanta et le croisement « $\omega_0 = 4\omega$ » viennent disparaître à l'origine pour le deuxième zéro de la fonction de Bessel ($2\Omega_1/\omega = 5,52$). Et ainsi de suite... L'étude du diagramme d'énergie du spin habillé donne ainsi une vision globale des phénomènes et permet de comprendre leur évolution lorsque l'intensité de la radiofréquence augmente et qu'un traitement perturbatif n'est plus valable.

RÉFÉRENCES

C. Cohen-Tannoudji, « Optical pumping and interactions of atoms with the electromagnetic field » in Cargese Lectures in Physics, vol. 2, ed. M. Levy (Gordon and Breach, 1968), p. 347.

S. Haroche, Thèse d'état, Paris 1971, publiée dans Annales de Physique **6**, 189 et 327 (1971). Le lecteur pourra trouver dans cette dernière référence une description des résultats expérimentaux et une généralisation du traitement présenté dans ce complément à d'autres situations (autres polarisations du champ de radiofréquence, spins $J > \frac{1}{2}$).

Une interprétation des résonances de croisements ($\omega_0 = 2\omega, 4\omega\dots$) en termes d'interférences entre amplitudes de transition multiphotoniques impliquant à la fois des photons optiques et de radiofréquence peut être trouvée dans C. Cohen-Tannoudji et S. Haroche, J. Physique **30**, 125 (1969).

COMPLÉMENT B_{VI}

**PROCESSUS COLLISIONNELS
EN PRÉSENCE D'IRRADIATION LASER**

De nombreuses différences existent entre les spectres d'émission d'un atome isolé et ceux d'un atome subissant des collisions contre d'autres atomes. Considérons par exemple le spectre de la lumière de fluorescence émise par un atome à deux niveaux. En l'absence de collisions, un tel spectre est constitué d'un triplet symétrique où les deux bandes latérales ont même intensité (voir § E-1). De plus, à la limite des grands désaccords par rapport à la résonance, l'intensité de la raie centrale du triplet est proportionnelle à Ω_1^2 (où Ω_1 est la fréquence de Rabi) alors que l'intensité des bandes latérales varie comme Ω_1^4 . Nous allons montrer dans ce complément qu'en présence de collisions, le triplet de fluorescence devient asymétrique. En outre, à la limite des grands désaccords, la bande latérale dont la fréquence est voisine de la fréquence atomique ω_0 change de comportement, son intensité devenant elle aussi proportionnelle à Ω_1^2 . Le spectre d'émission contient alors deux raies dominantes, l'une à la fréquence du laser ω_L et l'autre à la fréquence atomique ω_0 (figure 1). Cette raie à la fréquence ω_0 provient de l'excitation du niveau b dans un processus assisté par collision, la collision fournissant le défaut d'énergie $\hbar(\omega_0 - \omega_L)$ entre l'énergie du niveau b (ligne en traits pleins sur la figure 1) et l'énergie atteinte à partir du niveau a par absorption d'un photon (ligne en traits tiretés sur la figure 1). Or, nous savons que cet échelon intermédiaire du processus d'excitation peut en réalité être interprété comme un

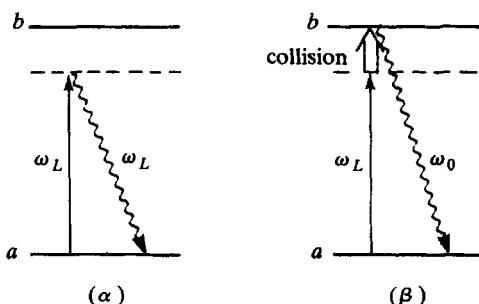


Figure 1. Raies dominantes observées dans le spectre d'émission d'un atome soumis à des collisions. Outre la diffusion Rayleigh à la fréquence ω_L (Fig. 1.α), on observe une émission à la fréquence ω_0 due à l'excitation du niveau b dans un processus assisté par collision (Fig. 1.β).

niveau d'énergie du système global atome + photons (voir discussion du paragraphe C-1 du chapitre II à propos de la figure 13). La méthode de l'atome habillé est donc tout indiquée pour aborder l'étude des processus collisionnels en présence de rayonnement. C'est un tel point de vue que nous allons exposer dans ce complément (*).

Après avoir introduit les paramètres décrivant la relaxation collisionnelle d'un atome en l'absence de rayonnement (§ 1), nous décrivons l'effet des collisions dans la base des états propres de l'atome habillé (§ 2). Nous étudions ensuite les modifications des spectres d'absorption et d'émission de l'atome dues aux collisions (§ 3). Enfin, nous indiquons comment les taux de transfert entre niveaux de l'atome habillé peuvent être calculés dans deux limites différentes correspondant à des écarts à résonance petits ou grands devant l'inverse de la durée τ_{coll} d'une collision (§ 4).

1. Relaxation collisionnelle en l'absence d'irradiation laser

a) HYPOTHÈSES SIMPLIFICATRICES

Considérons un atome A à deux niveaux a, b placé dans un gaz constitué d'atomes X et subissant de façon aléatoire des chocs contre ces atomes. La durée τ_{coll} de chaque collision est supposée petite devant l'intervalle T_{coll} séparant deux collisions : les collisions sont donc binaires et bien séparées dans le temps. L'énergie cinétique moyenne des atomes ($3k_B T/2$) est supposée bien plus petite que $\hbar\omega_0 = E_b - E_a$, de sorte que l'excitation du niveau b à partir du niveau a au cours d'une collision est énergétiquement impossible. L'énergie du premier niveau excité de l'atome X est supposée également très grande devant $\hbar\omega_0$. Il s'ensuit que lors d'une collision, il n'est pas possible de transférer l'énergie de l'atome A excité à l'atome X . Plus généralement, nous supposerons qu'il n'y a pas de désexcitation non radiative (« quenching ») de b vers a au cours d'une collision.

En conclusion, le seul effet des collisions considérées ici est de modifier les énergies des niveaux de A pendant la durée de la collision. Appelons donc $E_a(r)$ et $E_b(r)$ les énergies des niveaux a et b de l'atome A en présence de l'atome X à la distance r (voir figure 2) (**). Durant la collision, la fréquence de Bohr associée à la transition $a \leftrightarrow b$ est

(*) Un tel point de vue est utilisé dans S. Reynaud et C. Cohen-Tannoudji, J. Physique 43, 1021 (1982).

(**) En revanche, nous supposons que les fonctions d'onde des niveaux a et b sont très peu modifiées par la présence de l'atome X . En particulier, l'élément de matrice du dipôle électrique de l'atome A entre les états a et b est supposé être le même que pour un atome isolé.

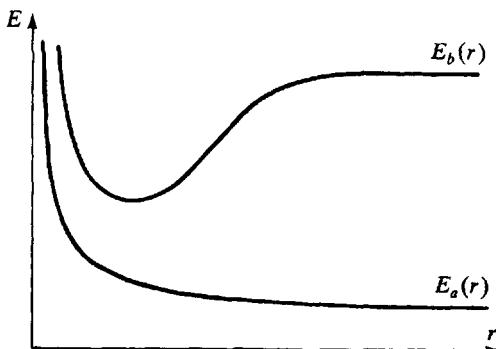


Figure 2. Niveaux d'énergie de l'atome A en présence d'un atome X à la distance r .

modifiée de sorte que l'effet essentiel de la collision est d'induire un déphasage sur l'oscillation du dipôle atomique. C'est pourquoi on donne le nom de collisions déphasantes à ce type de collisions.

Pour simplifier, nous traiterons les collisions en supposant que l'atome A est immobile et que les atomes X décrivent des trajectoires classiques rectilignes (*).

b) ÉQUATION PILOTE DÉCRIVANT L'EFFET DES COLLISIONS SUR L'ATOME ÉMETTEUR

Etudions d'abord l'effet d'une collision élémentaire. Les hypothèses faites au paragraphe précédent entraînent que les éléments diagonaux σ_{aa} et σ_{bb} de la matrice densité σ_A de l'atome A ne changent pas. En revanche, l'élément non diagonal est modifié d'une quantité qui, en représentation d'interaction, s'écrit

$$\Delta\tilde{\sigma}_{ba} = - (1 - e^{-i\phi}) \tilde{\sigma}_{ba} \quad (1)$$

où ϕ est le déphasage accumulé lors de la collision. Celui-ci est égal à

$$\phi = \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\omega_{ba}(t) - \omega_0] \quad (2)$$

$\omega_{ba}(t)$ représentant la fréquence instantanée d'oscillation du dipôle :

$$\omega_{ba}(t) = \frac{E_b(r(t)) - E_a(r(t))}{\hbar} \quad (3)$$

(*) Les effets associés au changement de vitesse de l'atome à l'issue de la collision sont étudiés par exemple par P.R. Berman in Les Houches XXXVIII, « New Trends in Atomic Physics », ed. G. Grynberg et R. Stora (North-Holland, 1984) page 451.

Considérons un intervalle de temps Δt long devant la durée τ_{coll} d'une collision et court devant l'intervalle de temps T_{coll} séparant deux collisions ($\tau_{\text{coll}} \ll \Delta t \ll T_{\text{coll}}$). Puisque $\Delta t \ll T_{\text{coll}}$, la probabilité pour qu'un atome A ait subi une collision pendant Δt est très faible, de sorte que la modification $\Delta\tilde{\sigma}_{ba}$ de $\tilde{\sigma}_{ba}$ pendant Δt est petite. En revanche, comme $\Delta t \gg \tau_{\text{coll}}$, toute collision qui s'est produite pendant l'intervalle Δt a eu le temps de se dérouler entièrement. Pour trouver $\Delta\tilde{\sigma}_{ba}$, il faut sommer la relation (1) sur toutes les collisions possibles. Pendant Δt , le nombre de collisions que subit l'atome A avec un atome X dont la vitesse est comprise dans l'élément de volume d^3v autour de v et dont la trajectoire a un paramètre d'impact compris entre b et $b + db$ est :

$$\Delta N(b, v) = N 2\pi b db |\mathbf{v}| f(\mathbf{v}) d^3v \Delta t \quad (4)$$

où N est le nombre d'atomes X par unité de volume et $f(\mathbf{v})$ leur distribution de vitesses. La variation $\Delta\tilde{\sigma}_{ba}/\Delta t$ peut donc s'écrire :

$$\frac{\Delta\tilde{\sigma}_{ba}}{\Delta t} = - \langle 1 - e^{-i\phi} \rangle_{\text{coll}} \tilde{\sigma}_{ba} \quad (5)$$

avec

$$\langle 1 - e^{-i\phi} \rangle_{\text{coll}} = N \int_0^\infty 2\pi b db \int |\mathbf{v}| f(\mathbf{v}) [1 - e^{-i\phi(b, v)}] d^3v \quad (6)$$

où $\phi(b, v)$ est le déphasage pour une collision associée à une trajectoire de paramètre d'impact b et de vitesse relative v . Appelons γ et η les parties réelle et imaginaire de $\langle 1 - e^{-i\phi} \rangle_{\text{coll}}$:

$$\gamma = \langle 1 - \cos \phi \rangle_{\text{coll}} \quad (7.a)$$

$$\eta = \langle \sin \phi \rangle_{\text{coll}} \quad (7.b)$$

Pour des temps longs devant τ_{coll} , l'évolution de $\tilde{\sigma}_{ba}$ peut être décrite par la « moyenne à gros grains » (5), de sorte que

$$\frac{d\tilde{\sigma}_{ba}}{dt} \simeq \frac{\Delta\tilde{\sigma}_{ba}}{\Delta t} = - (\gamma + i\eta) \tilde{\sigma}_{ba} \quad (8)$$

En revanche, comme nous l'avons mentionné plus haut, les collisions déphasantes n'introduisent pas de transfert d'un niveau atomique à l'autre, ce qui conduit aux équations suivantes pour les populations

$$\frac{d\tilde{\sigma}_{aa}}{dt} = \frac{d\tilde{\sigma}_{bb}}{dt} = 0 \quad (9)$$

Notons pour finir que les équations (8) et (9) peuvent être décrites par

une seule équation opératorielle

$$\frac{d}{dt} \tilde{\sigma}_A = -\frac{\gamma}{2} \tilde{\sigma}_A + 2\gamma S_z \tilde{\sigma}_A S_z - i\eta (S_z \tilde{\sigma}_A - \tilde{\sigma}_A S_z) \quad (10)$$

où S_z est l'opérateur défini par $S_z|a\rangle = -(1/2)|a\rangle$, $S_z|b\rangle = (1/2)|b\rangle$ (voir équation (A.15.c) du chapitre V).

Remarque

Tout système à deux niveaux peut être considéré comme un spin fictif (voir § A-4 du chapitre V). Comme une collision déphasante modifie la différence d'énergie entre les deux niveaux, son effet en termes de spin fictif est équivalent à celui d'un champ magnétique $\mathbf{b}(t)$ parallèle à $0z$ qui serait appliqué au spin pendant la durée de la collision. L'angle ϕ représente alors l'angle de rotation du spin autour de $0z$ sous l'effet de $\mathbf{b}(t)$. Notons que nous n'avons fait aucune hypothèse sur ϕ et que cet angle peut correspondre à une rotation supérieure à 2π .

2) Relaxation collisionnelle en présence d'irradiation laser

a) LE POINT DE VUE DE L'ATOME HABILLÉ

Les collisions apparaissent également comme un processus de relaxation pour l'atome habillé et il est possible de décrire leur effet à l'aide d'une équation pilote. En dépit du grand nombre de niveaux de l'atome habillé, le nombre de paramètres nécessaires pour décrire l'effet des collisions déphasantes est relativement restreint. Cela tient, d'une part au choix d'un modèle simple de collision (celui du paragraphe 1-a), d'autre part au fait qu'il est généralement légitime d'utiliser l'approximation séculaire permettant de découpler l'évolution des populations de celle des cohérences (ou encore l'évolution des cohérences ayant des fréquences propres différentes).

b) ÉVOLUTION DES POPULATIONS : TRANSFERTS COLLISIONNELS ENTRE NIVEAUX HABILLÉS

Notons d'abord que les collisions déphasantes ne peuvent pas induire de transfert de population d'une multiplicité à l'autre : $\Gamma_{i(N) \rightarrow j(N')}^{\text{coll}}$ est nul si $N \neq N'$. En effet, nous avons supposé au paragraphe 1-a que l'énergie susceptible d'être transférée au cours d'une collision est de l'ordre de $k_B T$, quantité qui est petite devant une énergie optique. En revanche, $k_B T$ est en général grand devant l'écart $\hbar\Omega$ entre les niveaux $|1(N)\rangle$ et $|2(N)\rangle$ d'une même multiplicité et les collisions peuvent induire des transferts de $|1(N)\rangle$ vers $|2(N)\rangle$ avec un taux $\Gamma_{1(N) \rightarrow 2(N)}^{\text{coll}}$ que nous noterons w (pour N voisin de $\langle N \rangle$, w peut être considéré comme indépendant de N). Remarquons que la relation $\hbar\Omega \ll k_B T$

entraîne (voir équation (C.10) du chapitre IV) :

$$\Gamma_{2(N) \rightarrow 1(N)}^{\text{coll}} = \Gamma_{1(N) \rightarrow 2(N)}^{\text{coll}} = w \quad (11)$$

Par ailleurs, nous supposerons que Ω est grand devant γ , ce qui permettra d'appliquer l'approximation séculaire et de négliger les couplages entre populations et cohérences. L'équation d'évolution des populations $\pi_{i(N)}$ de l'atome habillé sous l'influence des collisions s'écrit donc :

$$\frac{d}{dt} \pi_{1(N)} = -w (\pi_{1(N)} - \pi_{2(N)}) \quad (12.a)$$

$$\frac{d}{dt} \pi_{2(N)} = -\frac{d}{dt} \pi_{1(N)} \quad (12.b)$$

Les collisions déphasantes tendent ainsi à égaliser les populations entre sous-niveaux d'une même multiplicité de l'atome habillé (figure 3).

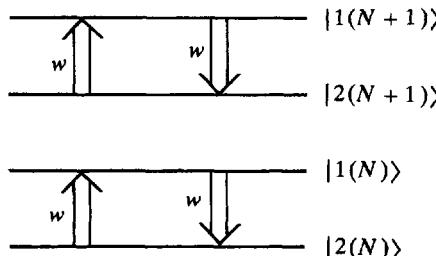


Figure 3. Transferts entre niveaux de l'atome habillé induits par les collisions déphasantes.

Remarque

Les équations (12) indiquent que, dans la base des niveaux habillés, la relaxation collisionnelle n'affecte pas seulement les cohérences, comme c'est le cas pour l'atome nu (voir équations (8) et (9)), mais également les populations. Dans le langage de la résonance magnétique nucléaire, on peut dire que la relaxation, qui est seulement de type T_2 pour l'atome nu, devient partiellement de type T_1 pour l'atome habillé. Un tel résultat se comprend bien à l'aide de l'image du spin fictif. Pour l'atome nu, le champ aléatoire $b(t)$ représentant l'effet de la collision déphasante est aligné le long de $0z$, comme le champ B_0 associé à l'écart d'énergie $\hbar\omega_0$ entre les niveaux b et a . En revanche, en présence d'une onde laser, $b(t)$ n'est plus aligné avec le champ total B_e dans le référentiel tournant. Rappelons en effet que les composantes de B_e le long de $0Z$ et $0X$ sont respectivement proportionnelles à $(\omega_0 - \omega_L)$ et Ω_1 (voir figure 1 du chapitre V). Ainsi, dans le référentiel tournant, le champ $b(t)$ a une composante orthogonale à B_e qui peut induire des transferts entre les états propres $|+\rangle$ et

$|-\rangle$ de la composante du spin selon \mathbf{B}_e . Les équations (12) ne font que traduire quantitativement l'existence de tels transferts entre niveaux habillés.

c) ÉVOLUTION DES COHÉRENCES. AMORTISSEMENT ET DÉPLACEMENT COLLISIONNELS

Considérons maintenant les cohérences $\langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N)\rangle$ et $\langle 2(N)|\tilde{\sigma}|1(N)\rangle$ entre deux sous-niveaux d'une même multiplicité $\mathcal{E}(N)$. La relaxation de ces cohérences peut être décrite au moyen de deux paramètres κ et ξ qui décrivent respectivement l'amortissement de la cohérence et le déplacement de sa fréquence d'évolution :

$$\frac{d}{dt} \langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N)\rangle = -(\kappa + i\xi) \langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N)\rangle \quad (13.a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle 2(N)|\tilde{\sigma}|1(N)\rangle = -(\kappa - i\xi) \langle 2(N)|\tilde{\sigma}|1(N)\rangle \quad (13.b)$$

Contrairement à la situation rencontrée dans le paragraphe D-2-c pour l'émission spontanée, il n'y a pas ici de transfert de cohérence entre deux multiplicités. Ceci est dû au modèle de collision envisagé ici qui néglige tout phénomène de transfert collisionnel entre niveaux séparés par des énergies optiques.

Remarque

L'influence des collisions sur l'évolution de la cohérence $\langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N')\rangle$ avec $N \neq N'$ est donnée par une équation semblable à (13.a)

$$\frac{d}{dt} \langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N')\rangle = -(\kappa + i\xi) \langle 1(N)|\tilde{\sigma}|2(N')\rangle \quad (14)$$

Ce point sera justifié dans le paragraphe 4.

d) FORME EXPLICITE DE L'ÉQUATION PILOTE À LA LIMITÉ D'IMPACT

Une situation particulièrement importante du point de vue expérimental est celle où $\Omega \tau_{\text{coll}} \ll 1$, Ω étant la fréquence de Rabi (B.19). Cette condition, qui implique que les relations $|\omega_L - \omega_0| \tau_{\text{coll}} \ll 1$ et $\Omega_1 \tau_{\text{coll}} \ll 1$ sont simultanément vérifiées, correspond à la « limite d'impact ». Dans ce cas, l'oscillation de Rabi à la fréquence Ω n'a pas le temps de s'effectuer pendant la durée τ_{coll} de la collision. Nous sommes alors dans une situation analogue à celle rencontrée pour l'émission spontanée dans le paragraphe D-1-a du chapitre. Il est donc, ici aussi, possible d'utiliser l'approximation des vitesses de variation indépendantes pour trouver la forme explicite de l'équation pilote de l'atome habillé. Cette approximation consiste à écrire que la vitesse de variation

de σ_{AL} est la somme de la vitesse de variation (10) associée aux collisions (les nombres quantiques relatifs aux photons laser restant « spectateurs ») et de celle due à l'hamiltonien H_{AL} de l'atome habillé

$$\frac{d}{dt} \sigma_{AL} = -\frac{i}{\hbar} [H_{AL}, \sigma_{AL}] - \frac{\gamma}{2} \sigma_{AL} + 2\gamma S_z \sigma_{AL} S_z - i\eta (S_z \sigma_{AL} - \sigma_{AL} S_z) \quad (15)$$

Nous allons maintenant projeter l'équation (15) sur la base $|i(N)\rangle$ des niveaux de l'atome habillé et montrer qu'il est possible à la limite d'impact d'exprimer les trois paramètres w , κ et ξ décrivant la relaxation collisionnelle de l'atome habillé en fonction des deux paramètres γ et η introduits pour l'atome nu. Pour cela, utilisons les éléments de matrice suivants déduits de (B.20) :

$$\langle 1(N) | S_z | 1(N') \rangle = \frac{1}{2} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \delta_{N,N'} = \delta_{N,N'} \frac{\cos 2\theta}{2} \quad (16.a)$$

$$\langle 2(N) | S_z | 2(N') \rangle = \frac{1}{2} (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta) \delta_{N,N'} = -\delta_{N,N'} \frac{\cos 2\theta}{2} \quad (16.b)$$

$$\langle 1(N) | S_z | 2(N') \rangle = -\sin \theta \cos \theta \delta_{N,N'} = -\delta_{N,N'} \frac{\sin 2\theta}{2} \quad (16.c)$$

Considérons d'abord (*) $\langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle$. En utilisant l'approximation séculaire, nous déduisons de (15) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle &= \\ &= -i(N - N') \omega_L \langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle - \frac{\gamma}{2} \langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle + \\ &\quad + \gamma \frac{\cos^2 2\theta}{2} \langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle + \gamma \frac{\sin^2 2\theta}{2} \langle 2(N) | \sigma | 2(N') \rangle \\ &= -i(N - N') \omega_L \langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle - \\ &\quad - \frac{\gamma}{2} \sin^2 2\theta [\langle 1(N) | \sigma | 1(N') \rangle - \langle 2(N) | \sigma | 2(N') \rangle] \end{aligned} \quad (17)$$

Pour $N = N'$, nous trouvons alors, en comparant (17) et (12.a), que la valeur de w à l'approximation d'impact n'est autre que :

$$w = \frac{\gamma}{2} \sin^2 2\theta \quad (18)$$

Par ailleurs, en utilisant de nouveau (15) et l'approximation séculaire, nous obtenons pour l'équation d'évolution de $\langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle &= -i[\Omega + (N - N') \omega_L] \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle - \\ &\quad - [\gamma(\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + i\eta \cos 2\theta] \langle 1(N) | \sigma | 2(N') \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

(*) Nous omettons l'indice AL de σ_{AL} lorsqu'il n'y a pas ambiguïté.

La comparaison avec (13.a) donne alors

$$\kappa = \gamma (\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) \quad (20)$$

$$\xi = \eta \cos 2\theta \quad (21)$$

Remarques

(i) Il est possible de retrouver le coefficient w à la limite d'impact par une approche plus physique. Pour cela, supposons que le système soit à l'instant initial $t_i = -T$ dans l'état $|1(N)\rangle$ et étudions l'effet d'une collision avec un atome X . Comme $\Omega \tau_{\text{coll}} \ll 1$, nous pouvons négliger le couplage atome-laser pendant la collision. L'effet de la collision est simplement de déphaser les coefficients du développement de l'état $|1(N)\rangle$ sur les états $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$. Partant à l'instant initial de l'état

$$|\psi(-T)\rangle = |1(N)\rangle = \sin \theta |a,N+1\rangle + \cos \theta |b,N\rangle \quad (22)$$

le système se retrouve à l'instant T dans l'état

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle &= \\ &= \sin \theta |a,N+1\rangle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^{+T} [E_a(r(t)) + (N+1)\hbar\omega_L] dt \right\} + \\ &\quad + \cos \theta |b,N\rangle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^{+T} [E_b(r(t)) + N\hbar\omega_L] dt \right\} \end{aligned} \quad (23)$$

En supposant que la collision se passe à l'intérieur de l'intervalle $(-T, T)$, nous pouvons, en utilisant (2), réécrire $|\psi(T)\rangle$ (à un facteur global de phase près) sous la forme :

$$|\psi(T)\rangle = \sin \theta |a,N+1\rangle + \cos \theta e^{-i\phi} e^{-2i(\omega_0 - \omega_L)T} |b,N\rangle \quad (24)$$

A la limite d'impact, on peut prendre un intervalle T grand devant τ_{coll} tout en ayant $|\delta_L|T \ll 1$ de sorte que :

$$|\psi(T)\rangle \simeq \sin \theta |a,N+1\rangle + \cos \theta e^{-i\phi} |b,N\rangle \quad (25)$$

L'état $|\psi(T)\rangle$ à l'issue de la collision diffère ainsi de $|1(N)\rangle$ à cause du déphasage $e^{-i\phi}$ sur la composante le long de $|b,N\rangle$. L'utilisation de (B.20) donne alors pour la probabilité de transition

$$|\langle 2(N) | \psi(T) \rangle|^2 = 2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta (1 - \cos \phi) \quad (26)$$

Le taux de transition de $|1(N)\rangle$ vers $|2(N)\rangle$ est obtenu par moyenne de (26) sur toutes les collisions possibles. Il suffit alors d'utiliser (7.a) pour retrouver l'expression (18) donnant w .

(ii) Un raisonnement analogue à celui de la remarque précédente permet de comprendre également certains effets d'origine collisionnelle en optique et en spectroscopie non linéaires. Considérons, à titre d'exemple, un atome à trois niveaux $\{a, b, b'\}$ identique à celui de la figure 14 du chapitre. Supposons que les deux faisceaux incidents de fréquences

ω_L et ω'_L excitant les transitions $a \leftrightarrow b$ et $a \leftrightarrow b'$ soient non résonnantes et que $\Omega_1/|\delta_L|$ et $\Omega'_1/|\delta'_L|$ soient petits devant 1 (avec $\delta_L = \omega_L - \omega_0$, $\delta'_L = \omega'_L - \omega'_0$). L'atome étudié subit également des collisions avec des atomes X et les conditions définissant la limite d'impact ($|\delta_L|, |\delta'_L| \ll \tau_{\text{coll}}^{-1}$) sont supposées vérifiées. Les états propres de l'atome habillé dans la multiplicité $\mathcal{E}(N, N')$ introduite en (E.40) sont :

$$|1(N, N')\rangle = -\frac{\Omega_1}{2\delta_L} |a, N+1, N'+1\rangle + |b, N, N'+1\rangle \quad (27.a)$$

$$|2(N, N')\rangle = -\frac{\Omega'_1}{2\delta'_L} |a, N+1, N'+1\rangle + |b', N+1, N'\rangle \quad (27.b)$$

$$\begin{aligned} |3(N, N')\rangle &= |a, N+1, N'+1\rangle + \\ &+ \frac{\Omega_1}{2\delta_L} |b, N, N'+1\rangle + \frac{\Omega'_1}{2\delta'_L} |b', N+1, N'\rangle \end{aligned} \quad (27.c)$$

Si le système est initialement dans l'état $|3(N, N')\rangle$ et qu'il subit une collision avec un atome X , une démonstration analogue à celle faite dans la remarque précédente permet de montrer que son état à l'issue de la collision est :

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle &= |a, N+1, N'+1\rangle + \frac{\Omega_1}{2\delta_L} e^{-i\phi} |b, N, N'+1\rangle + \\ &+ \frac{\Omega'_1}{2\delta'_L} e^{-i\phi'} |b', N+1, N'\rangle \end{aligned} \quad (28)$$

où $\phi' = \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\omega_{b'a}(t) - \omega'_0)$ est le déphasage de la cohérence entre les états a et b' induit par la collision. Comme l'état $|\psi(T)\rangle$ diffère de l'état $|3(N, N')\rangle$, nous trouvons des transferts vers les niveaux $|2(N, N')\rangle$ et $|1(N, N')\rangle$ analogues à ceux discutés dans la remarque précédente. De surcroît, une cohérence entre les états $|1(N, N')\rangle$ et $|2(N, N')\rangle$ est créée par la collision :

$$\begin{aligned} \langle 1(N, N') | \psi(T) \rangle \langle \psi(T) | 2(N, N') \rangle &= \\ &= \frac{\Omega_1 \Omega'_1}{4\delta_L \delta'_L} (1 - e^{-i\phi}) (1 - e^{i\phi'}) \\ &= \frac{\Omega_1 \Omega'_1}{4\delta_L \delta'_L} [(1 - e^{-i\phi}) + (1 - e^{i\phi'}) - (1 - e^{-i(\phi - \phi')})] \end{aligned} \quad (29)$$

La moyenne sur les collisions conduit à un taux moyen d'excitation de la cohérence égal à

$$w^{\text{coh}} = \frac{\Omega_1 \Omega'_1}{4\delta_L \delta'_L} (\gamma_{ba} + \gamma_{b'a}^* - \gamma_{bb'}) \quad (30)$$

où $\gamma_{ba} = \gamma + i\eta$, $\gamma_{b'a}$ et $\gamma_{bb'}$ étant associés de façon analogue à la relaxation des cohérences σ_{ba} et $\sigma_{bb'}$ de l'atome nu. Le terme du second membre de (30) est généralement différent de zéro, ce qui montre que les collisions sont susceptibles de créer des cohérences entre niveaux de

l'atome habillé. Par ailleurs, nous savons (voir complément A_{VI}, § 1-c) qu'une cohérence ainsi excitée passe par une valeur résonnante lorsque sa fréquence d'évolution propre est nulle. La fréquence d'évolution de la cohérence entre $|2(N,N')\rangle$ et $|1(N,N')\rangle$ étant $(\delta_L - \delta'_L)$, le processus induit par collision que nous étudions ici doit être résonnant lorsque $\delta_L = \delta'_L$, c'est-à-dire quand $E_b - E_{b'} = \hbar(\omega_L - \omega'_L)$. La méthode de l'atome habillé permet donc de comprendre comment les collisions peuvent faire apparaître des résonances associées à des fréquences de Bohr entre niveaux excités (*). Nous présentons plus loin (voir la remarque (ii) du paragraphe 3-d) un exemple de situation physique où de telles résonances peuvent apparaître.

3. Modifications introduites par les collisions sur l'émission et l'absorption de lumière par l'atome. Redistribution collisionnelle

Nous étudions maintenant comment la fluorescence de résonance d'un atome excité par une onde laser est modifiée quand cet atome subit en plus des collisions.

a) PRISE EN COMPTE DE L'ÉMISSION SPONTANÉE

Dans le point de vue de l'atome habillé, il faut tenir compte alors de l'existence de deux processus de relaxation, la relaxation « radiative » due aux processus d'émission spontanée et la relaxation « collisionnelle » produite par les collisions. Le premier processus, étudié dans le chapitre (§ C-1 et partie D), est caractérisé par un temps de corrélation τ_{c1} , au plus de l'ordre d'une période optique $1/\omega_0$, et un temps de relaxation T_{R1} égal à Γ^{-1} . Pour le second processus, étudié dans le paragraphe précédent, le temps de corrélation τ_{c2} est de l'ordre du temps de collision τ_{coll} et le temps de relaxation T_{R2} de l'ordre du temps entre collisions T_{coll} .

La possibilité de décrire séparément chacun de ces processus de relaxation par une équation pilote est due à l'existence pour chacun d'eux de deux échelles de temps bien distinctes, ce qui se traduit par les deux conditions

$$\tau_{c1} \ll T_{R1} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\omega_0} \ll \Gamma^{-1} \quad (31.a)$$

$$\tau_{c2} \ll T_{R2} \quad \text{ou} \quad \tau_{coll} \ll T_{coll} \quad (31.b)$$

Lorsque les deux processus de relaxation agissent ensemble, comme nous le supposons ici, il faut, pour pouvoir calculer une vitesse de

(*) Pour plus de détails, voir G. Grynberg, J. Phys. B 14, 2089 (1981). La première observation d'une telle résonance a été obtenue dans une expérience de mélange à quatre ondes par Y. Prior, A.R. Bogdan, M. Dagenais and N. Bloembergen, Phys. Rev. Lett. 46, 111 (1981).

variation « à gros grains » de σ_{AL} , introduire un intervalle de temps Δt qui soit, à la fois long devant τ_{c1} et τ_{c2} et court devant T_{R1} et T_{R2} , ce qui implique, en plus des conditions (31), que :

$$\tau_{c1} \ll T_{R2} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\omega_0} \ll T_{\text{coll}} \quad (32.a)$$

$$\tau_{c2} \ll T_{R1} \quad \text{ou} \quad \tau_{\text{coll}} \ll \frac{1}{F} \quad (32.b)$$

Nous supposerons dans ce qui suit que les conditions (32) sont également vérifiées.

Notons enfin que, comme τ_{c1} est en général très petit devant τ_{c2} , un processus d'émission spontanée peut se dérouler entièrement au cours d'une collision. La probabilité pour qu'un tel événement se produise est de l'ordre de $\tau_{\text{coll}}/T_{\text{coll}}$, qui est très petit devant 1 d'après (31.b) (*). Cette condition permet donc également de négliger toute modification d'un processus de relaxation par l'autre. Finalement, pour obtenir l'équation pilote de l'atome habillé, il suffit d'ajouter indépendamment les termes de relaxation radiative et collisionnelle, calculés comme si chaque processus de relaxation agissait seul. On obtient ainsi :

$$\frac{d}{dt} \sigma_{AL} = -\frac{i}{\hbar} [H_{AL}, \sigma_{AL}] + \left\{ \frac{d}{dt} \sigma_{AL} \right\}_{\text{rad}} + \left\{ \frac{d}{dt} \sigma_{AL} \right\}_{\text{coll}} \quad (33)$$

où $\{d\sigma_{AL}/dt\}_{\text{rad}}$ est donné par l'équation (D.3) du chapitre et où $\{d\sigma_{AL}/dt\}_{\text{coll}}$ est donné par les équations (12) et (13) de ce complément.

Remarques

(i) Les conditions (31) et (32), qui permettent de justifier la structure de l'équation (33), ne font pas intervenir la fréquence de Rabi généralisée $\Omega = [\Omega_1^2 + \delta_L^2]^{1/2}$. La comparaison entre Ω et τ_c ou entre Ω et T_{Ri} ($i = 1, 2$) apparaît à un stade ultérieur. Par exemple, quand $\Omega \tau_{c2} \approx \Omega \tau_{\text{coll}} \ll 1$ (limite d'impact), les termes $\{d\sigma_{AL}/dt\}_{\text{coll}}$ ont la même forme que pour l'atome nu, les photons laser restant spectateurs, car on peut négliger le couplage atome-laser pendant la durée de la collision. Par ailleurs, les conditions $\Omega T_{R1} \gg 1$ et $\Omega T_{R2} \gg 1$ sont à la base de l'approximation séculaire.

(ii) L'équation (33) et le théorème de régression quantique ne permettent pas de calculer correctement la fréquence des photons émis spontanément

(*) Ceci suppose bien sûr que la collision ne rend pas permise une transition spontanée qui serait autrement quasi interdite (par exemple si a et b sont de même parité). De telles collisions ne pourraient d'ailleurs pas être décrites dans le cadre du modèle choisi ici puisque nous avons supposé que l'élément de matrice du dipôle entre a et b varie peu au cours de la collision (voir § 1-a).

au cours d'une collision, car la fréquence atomique est alors fortement perturbée (voir Fig. 2). L'erreur commise est cependant négligeable car elle ne concerne qu'une petite fraction $\tau_{\text{coll}}/T_{\text{coll}}$ des photons émis.

b) POPULATIONS RÉDUITES STATIONNAIRES

A partir de l'équation (33), il est possible de déterminer les valeurs des populations stationnaires et donc l'intensité des trois raies du spectre de fluorescence de fréquences ω_L , $\omega_L - \Omega$ et $\omega_L + \Omega$.

Ainsi, une démarche analogue à celle du chapitre permet de déduire de (33) les équations d'évolution des populations réduites. Plus précisément, la prise en compte du terme (12) d'origine collisionnelle conduit à généraliser les équations (D.20) sous la forme suivante :

$$\dot{\pi}_1 = -\pi_1 \Gamma_{1 \rightarrow 2} + \pi_2 \Gamma_{2 \rightarrow 1} - w (\pi_1 - \pi_2) \quad (34.a)$$

$$\dot{\pi}_2 = -\pi_2 \Gamma_{2 \rightarrow 1} + \pi_1 \Gamma_{1 \rightarrow 2} - w (\pi_2 - \pi_1) \quad (34.b)$$

La solution stationnaire de ces équations est :

$$\pi_1^{st} = \frac{\Gamma_{2 \rightarrow 1} + w}{\Gamma_{1 \rightarrow 2} + \Gamma_{2 \rightarrow 1} + 2w} \quad (35.a)$$

$$\pi_2^{st} = \frac{\Gamma_{1 \rightarrow 2} + w}{\Gamma_{1 \rightarrow 2} + \Gamma_{2 \rightarrow 1} + 2w} \quad (35.b)$$

soit encore, compte tenu de (D.11)

$$\pi_1^{st} = \frac{\Gamma \sin^4 \theta + w}{\Gamma (\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + 2w} \quad (36.a)$$

$$\pi_2^{st} = \frac{\Gamma \cos^4 \theta + w}{\Gamma (\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + 2w} \quad (36.b)$$

Il est facile de vérifier sur les expressions (35) ou (36) que les collisions tendent à diminuer la différence $|\pi_1^{st} - \pi_2^{st}|$ entre les populations stationnaires en accord avec l'image de la figure 3.

c) INTENSITÉ DES TROIS COMPOSANTES DU TRIPLET DE FLUORESCENCE

Les deux raies latérales centrées en $(\omega_L - \Omega)$ et $(\omega_L + \Omega)$ ont des poids égaux en l'absence de collisions. Un tel résultat n'est plus vrai en présence de collisions. Le poids de la raie centrée en $(\omega_L + \Omega)$, égal à $\pi_1^{st} \Gamma_{1 \rightarrow 2}$ d'après (E.17), diffère de celui de la raie centrée en $(\omega_L - \Omega)$ qui d'après (E.18) est égal à $\pi_2^{st} \Gamma_{2 \rightarrow 1}$. En utilisant (D.11) et (36), nous trouvons en effet

$$I(\omega_L + \Omega) = \Gamma \cos^4 \theta \frac{\Gamma \sin^4 \theta + w}{\Gamma (\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + 2w} \quad (37.a)$$

$$I(\omega_L - \Omega) = \Gamma \sin^4 \theta \frac{\Gamma \cos^4 \theta + w}{\Gamma(\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + 2w} \quad (37.b)$$

qui ne coïncident pas lorsque $w \neq 0$ (en dehors du cas de l'excitation résonnante où $\sin^2 \theta = \cos^2 \theta = \frac{1}{2}$).

Le poids total de la raie centrale, qui se déduit de (E.23) et (D.11), est inchangé

$$I(\omega_L) = \Gamma \cos^2 \theta \sin^2 \theta \quad (37.c)$$

mais la répartition entre contributions cohérente et incohérente est modifiée. En effet, le poids de la raie cohérente qui, d'après (E.25), est proportionnel à $\Gamma_{1 \rightarrow 1} (\pi_1^s - \pi_2^s)^2$ diminue en présence de collisions.

En régime stationnaire, le nombre de photons absorbés est égal au nombre de photons émis spontanément. Il s'ensuit que l'absorption totale A varie comme la somme des trois poids (37.a), (37.b) et (37.c) qui peut se mettre sous la forme :

$$A = \frac{\Gamma}{2} \left[1 - \frac{\Gamma \cos^2 2\theta}{\Gamma(\cos^4 \theta + \sin^4 \theta) + 2w} \right] \quad (38)$$

Il apparaît ainsi clairement que A est une fonction croissante de w , c'est-à-dire que l'absorption augmente en présence de collisions.

d) INTERPRÉTATION PHYSIQUE À LA LIMITÉ $\Omega_1 \ll |\delta_L| \ll \tau_{\text{coll}}^{-1}$

Dans ce paragraphe, nous considérons le cas d'une excitation non résonnante à la limite perturbative ($\Omega_1 / |\delta_L| \ll 1$) et à la limite d'impact ($|\delta_L| \ll \tau_{\text{coll}}^{-1}$). Dans ces conditions, et en supposant en outre $\delta_L < 0$ (*), nous avons d'après (B.21) :

$$\theta \approx -\frac{\Omega_1}{2\delta_L} \quad (39)$$

Il s'ensuit que $\cos^2 \theta \sim 1$, $\sin^2 \theta \sim \Omega_1^2 / 4\delta_L^2$ et d'après (18)

$$w \approx \gamma \frac{\Omega_1^2}{2\delta_L^2} \quad (40)$$

Les intensités des diverses composantes du triplet, à l'ordre le plus bas en $\Omega_1 / |\delta_L|$ où elles apparaissent, valent alors d'après (37) :

$$I(\omega_0) \approx \frac{\gamma}{2} \frac{\Omega_1^2}{\delta_L^2} \quad (41.a)$$

(*) Dans le cas où $\delta_L > 0$, nous avons $\theta = (\pi/2) - (\Omega_1 / 2\delta_L)$ au lieu de (39). Partant de ce résultat, il est facile de montrer que les formules (40) à (43) démontrées dans ce paragraphe demeurent valables lorsque $\delta_L > 0$.

$$I(\omega_L) \simeq \frac{\Gamma}{4} \frac{\Omega_1^2}{\delta_L^2} \quad (41.b)$$

$$I(2\omega_0 - \omega_L) \simeq \frac{\Gamma}{16} \frac{\Omega_1^4}{\delta_L^4} \quad (41.c)$$

L'asymétrie entre les composantes du triplet de fluorescence apparaît clairement sur les formules (41.a) et (41.c). Alors que la raie de fréquence $(2\omega_0 - \omega_L)$ varie en $(\Omega_1/\delta_L)^4$, celle de fréquence ω_0 est bien plus grande puisqu'elle est proportionnelle à $(\Omega_1/\delta_L)^2$ seulement. En outre, à cet ordre de perturbation, cette raie dépend exclusivement des processus collisionnels comme le montre le coefficient γ de la formule (41.a). Notons d'ailleurs que le rapport $I(\omega_0)/I(\omega_L)$ ne dépend, ni de l'intensité du champ incident, ni du désaccord à résonance (si la condition d'impact reste vérifiée) et vaut :

$$\frac{I(\omega_0)}{I(\omega_L)} = \frac{2\gamma}{\Gamma} \quad (42)$$

Cette formule montre qu'on peut déterminer le coefficient de relaxation collisionnelle γ en mesurant le rapport entre les intensités de la raie de fluorescence de fréquence ω_0 et celle de la raie de diffusion Rayleigh à ω_L . L'absence de dépendance de (42) avec le champ incident tient au fait qu'à la limite perturbative, les deux processus considérés sont associés à l'absorption d'un seul photon incident (voir figures (1.b) et (1.a)).

Les résultats précédents peuvent être schématisés sur le diagramme des niveaux d'énergie de l'atome habillé (fig. 4). Le système a une probabilité relative voisine de 1 d'être dans l'état $|2(N)\rangle$ qui, à la limite

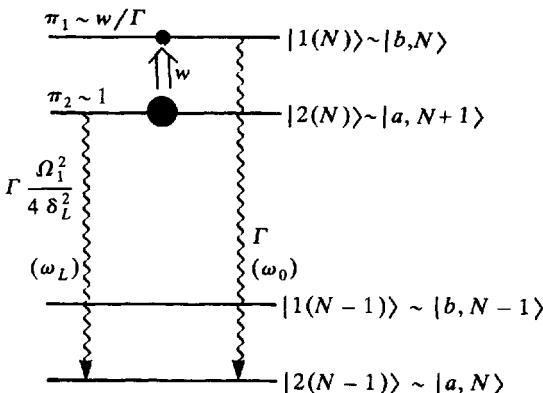


Figure 4. Schéma des processus radiatifs et collisionnels à la limite perturbative.

considérée, est peu différent de $|a,N + 1\rangle$ (cette probabilité importante est schématisée par le cercle de grande dimension de la figure 4). Comme le niveau $|2(N)\rangle$ est peu contaminé par $|b,N\rangle$, la probabilité d'émission spontanée à partir de ce niveau est très petite. En utilisant (D.11) et (39), on trouve $\Gamma \Omega_1^2 / 4\delta_L^2$ pour la probabilité de transition radiative de $|2(N)\rangle$ à $|2(N - 1)\rangle$ et une quantité encore plus petite, $\Gamma \Omega_1^4 / 16\delta_L^4$, pour la probabilité de transition de $|2(N)\rangle$ à $|1(N - 1)\rangle$. En revanche, le niveau $|1(N)\rangle$, qui est peu différent de $|b,N\rangle$, se désexcite facilement vers $|2(N - 1)\rangle \sim |a,N\rangle$ avec une probabilité égale à Γ . La population relative dans le niveau $|1(N)\rangle$ résulte d'une compétition entre l'alimentation due aux collisions dont la probabilité est w (donnée par la formule (40)) et une fuite due à l'émission spontanée. La probabilité de trouver le système dans l'état $|1(N)\rangle$ est donc simplement w/Γ .

Notons enfin qu'à la limite considérée dans ce paragraphe, le signal d'absorption (38) est égal (à l'ordre 2 en Ω_1/δ_L) à :

$$A = \frac{\Omega_1^2}{4\delta_L^2} (\Gamma + 2\gamma) \quad (43)$$

et correspond à la somme de l'intensité de la raie Rayleigh et de la raie à la fréquence atomique ω_0 . L'absorption augmente en présence de collisions. Plus précisément, A croît linéairement en fonction du nombre d'atomes perturbateurs X puisque γ est proportionnel à N d'après les formules (6) et (7).

Remarques

- (i) Au lieu d'observer la fluorescence sur la transition $b \leftrightarrow a$, on peut aussi sonder l'atome avec un second faisceau laser de fréquence ω'_L sur une transition partant du niveau b vers un niveau c d'énergie plus élevée. Le spectre d'excitation du niveau c comprend alors deux résonances : la première sera obtenue lorsque $\omega'_L + \omega_L = \omega_{ca}$ et est associée à l'excitation à deux photons du niveau c à partir du niveau a (figure 5.α). La seconde correspond à $\omega'_L = \omega_{cb}$ et est associée à un processus où l'atome est d'abord porté dans le niveau b dans un processus assisté par collisions, puis dans le niveau c par absorption d'un second photon résonnant pour la transition $c \leftrightarrow b$ (figure 5.β). Notons que les deux processus schématisés sur les figures (5.α) et (5.β) apparaissent au même ordre en champ uniquement en présence de collisions (*). Le rapport entre l'intensité de la raie à $\omega'_L = \omega_{cb}$ et celle à $\omega'_L = \omega_{ca} - \omega_L$ croît avec le taux de collisions. S'il est possible de négliger l'effet des niveaux intermédiaires autres que

(*) En l'absence de collisions, les atomes ne peuvent être effectivement portés dans le niveau b que par des processus non linéaires impliquant deux photons lasers ω_L (voir la figure 28 du chapitre II).

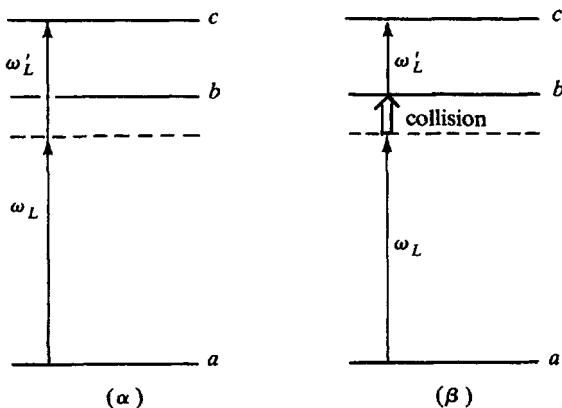


Figure 5. Absorption d'un faisceau sonde de fréquence ω'_L par un atome interagissant avec un faisceau non résonnant de fréquence ω_L et subissant des collisions. Le spectre d'excitation comporte deux résonances associées aux processus schématisés sur les figures (5.α) et (5.β).

b dans l'excitation à deux photons, le rapport entre les intensités des deux raies est à la limite d'impact égal à $2\gamma/\Gamma$ (*).

(ii) Considérons un atome possédant trois niveaux discrets a, b, b' et un continuum d'ionisation (figure 6.α). Cet atome interagit avec deux faisceaux laser incidents non résonnantes, de fréquences ω_L et ω'_L voisines de ω_0 et ω'_0 . Etudions l'ionisation résultant de l'absorption de deux photons, l'un de fréquence ω_L , l'autre de fréquence ω'_L . Outre l'ionisation résultant de l'absorption simultanée de ces deux photons, il existe, dans un environnement collisionnel, une ionisation par échelons où l'atome est porté dans une étape intermédiaire dans l'un des niveaux b ou b' par un processus d'excitation assisté par collision (figures (6.β) et (6.γ)).

Considérons alors les amplitudes de probabilité associées aux processus d'ionisation schématisés sur les figures (6.β) et (6.γ). Si le transfert d'énergie et d'impulsion dû à la collision est le même pour ces deux processus, il n'est pas possible de déterminer le chemin effectivement suivi par le système et une interférence entre les deux amplitudes de probabilité est alors possible. L'énergie transférée lors de la collision est égale à $\hbar\delta_L$ pour le processus (6.β) et à $\hbar\delta'_L$ pour le processus (6.γ). Une condition nécessaire pour que les deux diagrammes interfèrent est donc $\hbar\delta_L = \hbar\delta'_L$ c'est-à-dire encore :

$$E_b - E_{b'} = \hbar(\omega_L - \omega'_L) \quad (44)$$

On voit ainsi apparaître la condition de résonance mentionnée dans la remarque (ii) du paragraphe 2-d. Les collisions conduisent effectivement à

(*) Pour plus de détails, voir par exemple P.F. Liao, J.E. Bjorkholm and P.R. Berman, Phys. Rev. A21, 1927 (1980).

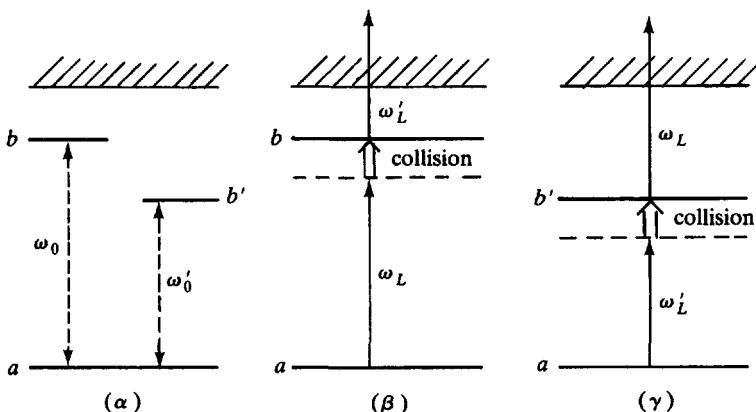


Figure 6. Schéma des niveaux considérés dans cette remarque (ii). Ionisation par absorption de deux photons dans un processus assisté par collisions. Le niveau excité dans l'étape intermédiaire peut être soit b , soit b' , selon que le premier photon absorbé est ω_L ou ω'_L .

une variation résonnante de la probabilité de photoionisation quand $\omega_L - \omega'_L$ varie autour de la valeur correspondant à l'écart entre les niveaux excités b et b' . On peut montrer que l'intensité de cette résonance dépend du facteur collisionnel (30) calculé plus haut.

(iii) Nous n'avons envisagé jusqu'ici que le cas où le champ incident est une onde plane. Si le champ incident est la superposition de deux ondes planes se propageant dans des directions différentes, le champ résultant est modulé spatialement. Ceci a plusieurs conséquences. D'abord, les fonctions d'onde de l'atome habillé changeant de point en point, le moment dipolaire de la transition $|i(N)\rangle \rightarrow |i(N+1)\rangle$ (avec $i = 1,2$) varie spatialement. Il s'ensuit que l'on crée ainsi un réseau de moments de transition, donc d'indice, qui va suivre instantanément les variations du champ appliqué. Par ailleurs, en présence de collisions, la probabilité de transition w entre les niveaux $|2(N)\rangle$ et $|1(N)\rangle$ est plus grande pour les atomes situés aux ventres de l'onde (voir formule (40)). On crée ainsi un réseau d'atomes excités. Le temps d'évolution caractéristique de ce second réseau est la durée de vie radiative du niveau b , c'est-à-dire $1/\Gamma$ (voir figure 4).

Ces réseaux atomiques donnent naissance à de nombreux effets en optique non linéaire. Considérons à titre d'exemple la situation où le champ habillant résulte de la superposition de deux ondes planes de fréquences ω_L et ω'_L et de vecteurs d'onde \mathbf{k} et \mathbf{k}' . Le champ habillant est alors modulé, non seulement spatialement, mais aussi temporellement (à la fréquence $\omega_L - \omega'_L$ que nous supposerons petite devant $|\delta_L|$). Les mécanismes donnant naissance aux réseaux de moments de transition et d'atomes excités considérés plus haut sont alors modulés dans le temps. A la différence du réseau de moments de transition qui suit instantanément

les variations temporelles du champ, le réseau d'atomes excités suit avec une constante de temps Γ^{-1} , ce qui conduit à un déphasage entre le réseau lumineux et le réseau d'atomes excités (*) et à un brouillage complet de ce dernier dès que $|\omega_L - \omega'_L| \gg \Gamma$.

Introduisons maintenant une onde sonde. Certains phénomènes de mélange à plusieurs ondes peuvent être interprétés comme résultant de la diffraction de l'onde sonde sur les réseaux atomiques créés par les ondes \mathbf{k} , ω_L et \mathbf{k}' , ω'_L . Le fait que l'amplitude du réseau d'atomes excités induit par collision varie de manière résonnante autour de $\omega_L = \omega'_L$ permet de comprendre pourquoi, en présence de collisions, la génération d'une nouvelle onde peut varier de manière résonnante sur un intervalle de largeur Γ autour de $\omega_L - \omega'_L = 0$ (**).

4. Aperçu sur le calcul du taux de transfert collisionnel

a) EXPRESSION DU TAUX DE TRANSFERT EN FONCTION DE LA MATRICE S DE COLLISION

Revenons maintenant au cas général et introduisons la matrice S décrivant l'évolution interne du système atome A + mode laser dans une collision avec le perturbateur X caractérisé par les paramètres initiaux b et v . Une telle collision remplace l'état initial décrit par $\tilde{\sigma}_{AL}$ par l'état final $S \tilde{\sigma}_{AL} S^+$. Si nous considérons des intervalles de temps Δt tels que $\tau_{\text{coll}} \ll \Delta t \ll T_{\text{coll}}$, la variation $\Delta \tilde{\sigma}_{AL}$ de la matrice densité du système global pendant Δt est égale à

$$\frac{\Delta \tilde{\sigma}_{AL}}{\Delta t} = \langle S \tilde{\sigma}_{AL} S^+ - \tilde{\sigma}_{AL} \rangle_{\text{coll}} \quad (45)$$

où la moyenne sur les collisions $\langle \rangle_{\text{coll}}$ a été définie par la formule (6). La quantité $\Delta \tilde{\sigma}_{AL}/\Delta t$ est la moyenne de $d \tilde{\sigma}_{AL}/dt$ sur des temps longs devant τ_{coll} . L'identification de ces deux quantités revient à faire une « moyenne à gros grains », c'est-à-dire à ignorer le comportement de $\tilde{\sigma}_{AL}$ pendant des temps très courts. Dans le cadre de cette approximation, l'équation pilote s'écrit

$$\frac{d \tilde{\sigma}_{AL}}{dt} = \langle S \tilde{\sigma}_{AL} S^+ - \tilde{\sigma}_{AL} \rangle_{\text{coll}} \quad (46)$$

Nous allons projeter cette équation sur la base $|i(N)\rangle$ des états propres de l'atome habillé. Comme nous avons supposé que les

(*) Un tel déphasage est à l'origine d'un échange d'énergie entre les deux ondes ; voir D. Grand-Clément, G. Grynberg et M. Pinard, Phys. Rev. Lett. **59**, 40 (1987).

(**) Voir A.R. Bogdan, M.W. Downer and N. Bloembergen, Opt. Lett. **6**, 348 (1981).

collisions ne peuvent pas coupler deux niveaux d'une multiplicité différente, les éléments de matrice de S vérifient la relation :

$$\langle i(N) | S | j(N') \rangle = \delta_{NN'} S_{ij} \quad (47)$$

Ecrivons, à titre d'exemple, l'équation d'évolution de $\langle 1(N) | \tilde{\sigma} | 1(N) \rangle$. En utilisant (46), (47) et l'approximation séculaire, nous trouvons

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle 1(N) | \tilde{\sigma} | 1(N) \rangle &= \langle (S_{11} S_{11}^* - 1) \rangle_{\text{coll}} \langle 1(N) | \tilde{\sigma} | 1(N) \rangle + \\ &+ \langle S_{12} S_{12}^* \rangle_{\text{coll}} \langle 2(N) | \tilde{\sigma} | 2(N) \rangle \end{aligned} \quad (48)$$

Or, l'unitarité de la matrice S entraîne que

$$S_{11} S_{11}^* + S_{12} S_{12}^* = 1 \quad (49)$$

ce qui permet de montrer que l'équation (48) coïncide avec l'équation (12) d'évolution des populations de l'atome habillé et donne l'expression de w :

$$w = \langle S_{12} S_{12}^* \rangle_{\text{coll}} \quad (50)$$

Pour la discussion physique qui suit, il est commode de réexprimer w en fonction des éléments de matrice de S dans la base découpée $\{ |a, N+1\rangle, |b, N\rangle \}$. Transformons donc $S_{12} = \langle 1(N) | S | 2(N) \rangle$ en utilisant (B.20). Il vient

$$\begin{aligned} \langle 1(N) | S | 2(N) \rangle &= \\ &= \langle 1(N) | a, N+1 \rangle \langle a, N+1 | S | a, N+1 \rangle \langle a, N+1 | 2(N) \rangle + \\ &+ \langle 1(N) | b, N \rangle \langle b, N | S | b, N \rangle \langle b, N | 2(N) \rangle + \\ &+ \langle 1(N) | a, N+1 \rangle \langle a, N+1 | S | b, N \rangle \langle b, N | 2(N) \rangle + \\ &+ \langle 1(N) | b, N \rangle \langle b, N | S | a, N+1 \rangle \langle a, N+1 | 2(N) \rangle \end{aligned} \quad (51)$$

c'est-à-dire encore

$$\begin{aligned} \langle 1(N) | S | 2(N) \rangle &= \\ &= \sin \theta \cos \theta [\langle a, N+1 | S | a, N+1 \rangle - \langle b, N | S | b, N \rangle] - \\ &- \sin^2 \theta \langle a, N+1 | S | b, N \rangle + \cos^2 \theta \langle b, N | S | a, N+1 \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

Il est parfois possible de négliger certains termes de l'équation (52). Considérons par exemple la limite d'impact. L'amplitude $\langle b, N | S | a, N+1 \rangle$, qui est associée à l'absorption d'un photon laser au cours de la collision, est de l'ordre de $\Omega_1 \tau_{\text{coll}}$ que nous avons supposé très petit devant 1. Les deux derniers termes de (52) sont donc d'ordre $\Omega_1 \tau_{\text{coll}}$ au plus. Le premier terme de (52) est, à la limite perturbative, de l'ordre de $\Omega_1 / |\delta_L|$. Il est plus grand que les deux derniers termes dans la mesure où $1 / |\delta_L| \gg \tau_{\text{coll}}$ à la limite d'impact. Il est donc possible dans ce cas de calculer l'effet des collisions en ne tenant compte

que des déphasages $\langle a, N+1 | S | a, N+1 \rangle$ et $\langle b, N | S | b, N \rangle$. C'est en fait ainsi que nous avons procédé dans le paragraphe 2-d (voir en particulier la remarque (i)). Nous analysons dans le paragraphe suivant une autre situation où c'est au contraire le dernier terme de (52) qui est prépondérant.

b) CAS OÙ LA FRÉQUENCE LASER DEVIENT RÉSONNANTE AU COURS DE LA COLLISION. LIMITÉ DES GRANDS DÉSACCORDS

Dans ce paragraphe, nous nous plaçons à la limite perturbative où $\Omega_1/|\delta_L| \ll 1$. En supposant $\delta_L < 0$, nous pouvons réécrire la formule (52) en nous limitant aux termes d'ordre inférieur ou égal à 1 en Ω_1/δ_L :

$$\begin{aligned} \langle 1(N) | S | 2(N) \rangle = - \frac{\Omega_1}{2\delta_L} [& \langle a, N+1 | S | a, N+1 \rangle - \\ & - \langle b, N | S | b, N \rangle] + \langle b, N | S | a, N+1 \rangle \end{aligned} \quad (53)$$

Nous avons vu au paragraphe précédent qu'à la limite d'impact le dernier terme du second membre de (53) est plus petit que le premier. Nous allons maintenant montrer que ce résultat n'est plus exact pour de grands désaccords $|\delta_L| > \tau_{\text{coll}}^{-1}$.

Considérons les niveaux d'énergie de la figure 2 et traçons les niveaux d'énergie du système atome A + mode laser en fonction de la distance r entre A et X . Nous voyons sur la figure 7 qu'il y a deux situations possibles selon le signe de δ_L . Quand $\omega_L < \omega_0$, les courbes représentant $E_b(r) + N\hbar\omega_L$ et $E_a(r) + (N+1)\hbar\omega_L$ se croisent en $r = r_0$ (figure 7.α) alors qu'il n'y a pas de croisement entre ces courbes de potentiel pour $\omega_L > \omega_0$ (figure 7.β). Envisageons d'abord le cas où la fréquence laser devient résonnante pendant la collision, c'est-à-dire le cas où il y a croisement de niveaux. Comme les énergies varient d'une quantité égale ou supérieure à $\hbar\delta_L$ pendant la durée τ_{coll} de la collision, l'écart ΔE entre les niveaux d'énergie au voisinage du point de croisement est en ordre de grandeur donné par $\Delta E = \hbar\delta_L(t - t_0)/\tau_{\text{coll}}$ où t_0 est l'instant où se produit le croisement (voir figure 8). La transition se produit essentiellement pendant l'intervalle de temps tel que $|t - t_0| \leq \hbar/\Delta E$ ce qui donne encore $|t - t_0| \sim (\tau_{\text{coll}}/|\delta_L|)^{1/2}$. L'amplitude de transition $\langle b, N | S | a, N+1 \rangle$ est, en ordre de grandeur, égale à $\Omega_1|t - t_0|$ c'est-à-dire $(|\delta_L|\tau_{\text{coll}})^{1/2}\Omega_1/|\delta_L|$. A la limite des grands désaccords ($|\delta_L|\tau_{\text{coll}} \gg 1$), le dernier terme du second membre de (53) est donc plus grand que le premier dont l'ordre de grandeur est $\Omega_1/|\delta_L|$. Dans cette limite, la probabilité de transition entre les niveaux habillés est donc simplement égale à $|\langle b, N | S | a, N+1 \rangle|^2$. Ce terme étant plus grand que le terme retenu à la limite d'impact, nous en déduisons que la probabilité de transition décroît plus lentement en fonction de

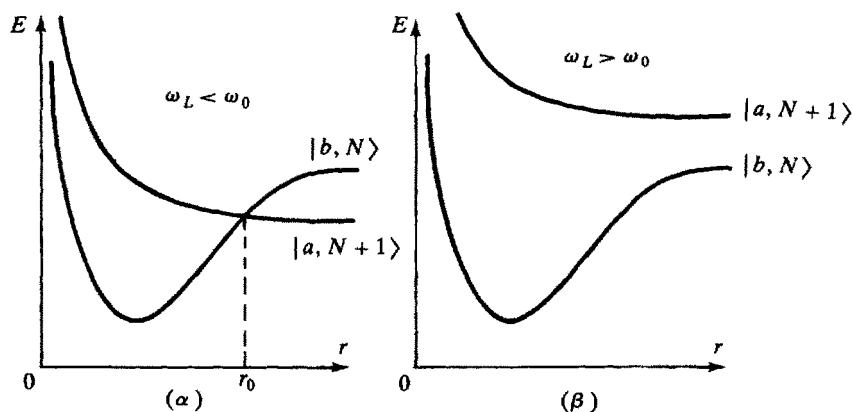


Figure 7. Variation des niveaux d'énergie $|a, N + 1\rangle$ et $|b, N\rangle$ en fonction de la distance r entre les atomes A et X . Schéma obtenu pour deux signes différents du désaccord à résonance : $\delta_L < 0$ (α) et $\delta_L > 0$ (β).

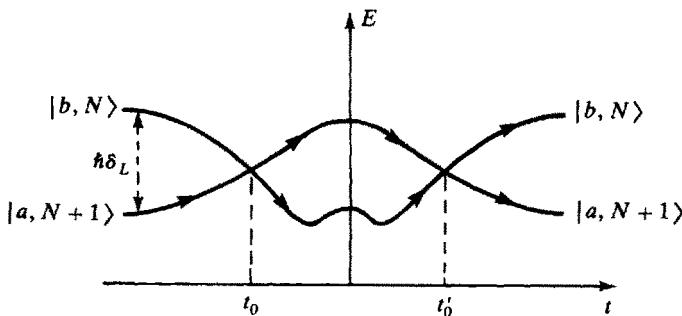


Figure 8. Variation des niveaux d'énergie non couplés en fonction du temps pendant une collision dans le cas $\omega_L < \omega_0$. Sous l'effet du couplage, un système préparé dans l'état $|a, N + 1\rangle$ avant la collision a la possibilité de transiter vers le niveau $|b, N\rangle$ au voisinage des points de croisement situés aux instants t_0 et t'_0 .

$|\delta_L|$ que la lorentzienne (41.a) trouvée à la limite d'impact. Un tel résultat est lié à l'existence d'un croisement entre les courbes de potentiel de la figure (7.α). Il s'ensuit que la probabilité de transition prendra des valeurs différentes pour des valeurs opposées de δ_L . Dans la situation de la figure 7, la probabilité de transition sera plus grande pour $\omega_L < \omega_0$ que pour $\omega_L > \omega_0$ (*).

(*) Une telle asymétrie entre les ailes de la raie d'absorption a été observée, par exemple par J.L. Carlsten, A. Szöke and M.G. Raymer, Phys. Rev. A15, 1029 (1977).

Remarque

Revenons à la situation rencontrée dans la figure (7.α) où il y a un croisement entre les courbes de potentiel et indiquons brièvement comment il est possible de calculer la probabilité de transition entre $|a,N+1\rangle$ et $|b,N\rangle$ dans cette situation. La transition étant due à l'existence du croisement de niveaux situé en $r = r_0$, on peut calculer la probabilité de transition pour chaque valeur du paramètre d'impact b et de la vitesse relative v au moyen de la formule de Landau

$$|\langle b,N | S | a,N+1 \rangle|^2 = \frac{\pi \hbar \Omega_i^2}{|\Delta \dot{E}|} \quad (54)$$

$\Delta \dot{E}$ étant la dérivée par rapport au temps de $E_b(r(t)) - E_a(r(t))$ prise en $t = t_0$. La formule (54) tient compte des deux croisements situés en t_0 et t'_0 . Pour obtenir w , il faut, d'après (50), moyenner (54) sur b et v . Notons cependant que pour de grandes valeurs de $|\delta_L|$, le croisement de niveaux en r_0 est associé à un très petit paramètre d'impact, de sorte que l'approximation des trajectoires classiques rectilignes n'est plus alors justifiée (*).

(*) Pour plus de détails, voir V.S. Lisitsa and S.I. Yakovlenko, J.E.T.P. **39**, 759 (1974) et **41**, 233 (1975).

Exercices

1. CALCUL DE LA DURÉE DE VIE RADIATIVE D'UN NIVEAU ATOMIQUE EXCITÉ. COMPARAISON AVEC LE TEMPS D'AMORTISSEMENT D'UN DIPÔLE CLASSIQUE

Une particule, de masse m et de charge q , est liée au voisinage de l'origine 0 par un potentiel statique $V(\mathbf{r})$. Soient H_P l'hamiltonien de cette particule

$$H_P = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) , \quad (1)$$

$|a\rangle$ le niveau fondamental d'énergie E_a , $|b\rangle$ le premier niveau excité, d'énergie E_b . Ces deux niveaux sont supposés discrets et l'on pose

$$E_b - E_a = \hbar\omega_0 \quad (2)$$

a) Soit H_I l'hamiltonien d'interaction en jauge de Coulomb entre cette particule et le rayonnement. Calculer l'élément de matrice de H_I entre l'état $|b;0\rangle$ (particule dans l'état b ; 0 photon) et l'état $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ (particule dans l'état a en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$). On négligera les effets liés au spin et on fera l'approximation des grandes longueurs d'onde consistant à négliger les variations spatiales du potentiel vecteur \mathbf{A} sur l'étendue des fonctions d'onde des états a et b .

b) Calculer le commutateur $[\mathbf{r}, H_P]$ et en déduire une relation entre les éléments de matrice $\langle a|\mathbf{p}|b\rangle$ et $\langle a|\mathbf{r}|b\rangle$. Exprimer l'élément de matrice $\langle a;\mathbf{k}\epsilon|H_I|b;0\rangle$ en fonction de $\mathbf{d} = \langle a|\mathbf{qr}|b\rangle$, élément de matrice du dipôle électrique de la particule. On supposera que a et b sont des niveaux de nombre quantique magnétique $m_\ell = 0$ de sorte que seule la composante le long de l'axe $0z$ de \mathbf{d} (notée d et supposée réelle) est différente de zéro.

c) Calculer la durée de vie radiative $\tau = \Gamma^{-1}$ du niveau excité, où Γ est la probabilité par unité de temps d'émission spontanée d'un photon à partir de b . On effectuera la sommation sur toutes les polarisations et directions du photon émis. Exprimer Γ en fonction de d , ω_0 et de diverses constantes fondamentales comme \hbar , c , ϵ_0 .

d) On suppose que la valeur de ω_0 et celle de l'étendue spatiale des fonctions d'onde des états a et b ont pour ordre de grandeur les valeurs correspondantes pour un atome d'hydrogène dans les états $1s$ et $2p$. Calculer un ordre de grandeur de $1/\omega_0\tau$. Exprimer le résultat en fonction de la constante de structure fine $\alpha = q^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$. Commenter ce résultat.

e) Soit Γ_{cl} l'inverse du temps d'amortissement du mouvement d'une particule classique de même charge, oscillant parallèlement à Oz à la fréquence ω_0 . On rappelle que (*)

$$\Gamma_{cl} = \frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 mc^3} \frac{\omega_0^2}{m} \quad (3)$$

Montrer que le taux d'émission spontanée Γ calculé plus haut peut s'écrire

$$\Gamma = \Gamma_{cl} f_{ab} \quad (4)$$

où f_{ab} est un paramètre sans dimension caractéristique de la transition atomique $a \leftrightarrow b$, appelé « force d'oscillateur » de la transition. Donner l'expression de f_{ab} .

Solution

a) A l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'hamiltonien H_I est égal à $-(q/m) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(0)$. La décomposition de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ en modes (voir expression (28) de l'appendice) permet de réécrire H_I sous la forme :

$$H_I = -\frac{q}{m} \sum_i \mathcal{A}_{\omega_i} [a_i \mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_i + a_i^+ \mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_i] \quad (5)$$

où $\mathcal{A}_{\omega_i} = (\hbar/2\varepsilon_0\omega_i L^3)^{1/2}$, ce qui donne :

$$\langle a; \mathbf{k} \cdot \mathbf{e} | H_I | b; 0 \rangle = -\frac{q}{m} \mathcal{A}_{\omega} \langle a | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | b \rangle \quad (6)$$

b) Pour calculer le commutateur de \mathbf{r} et H_P , remarquons que \mathbf{r} et $V(\mathbf{r})$ commutent entre eux, ce qui conduit à :

$$[\mathbf{r}, H_P] = i \hbar \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (7)$$

Nous trouvons alors pour l'élément de matrice de \mathbf{p}

$$\langle a | \mathbf{p} | b \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle a | [\mathbf{r}, H_P] | b \rangle = \frac{E_b - E_a}{i\hbar} m \langle a | \mathbf{r} | b \rangle \quad (8)$$

ce qui donne, compte tenu de (2) et (6)

$$\langle a; \mathbf{k} \cdot \mathbf{e} | H_I | b; 0 \rangle = i \omega_0 \langle a | q \mathbf{r} \cdot \mathbf{e} | b \rangle \mathcal{A}_{\omega} \quad (9)$$

Comme a et b ont des nombres quantiques $m_l = 0$, la seule composante de \mathbf{r} couplant ces niveaux est z . En utilisant $d = q \langle a | z | b \rangle$, nous obtenons :

$$\langle a; \mathbf{k} \cdot \mathbf{e} | H_I | b; 0 \rangle = i \omega_0 (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}_z) d \mathcal{A}_{\omega} \quad (10)$$

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément C_I.

c) La probabilité d'émission par unité de temps et d'angle solide d'un photon de polarisation ϵ est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \omega_0^2 (\epsilon \cdot \mathbf{e}_z)^2 d^2 \mathcal{A}_{\omega_0} \rho(E = \hbar\omega_0) \quad (11)$$

où $\rho(E)$ est donné par la formule (46) du complément A_I . En remplaçant $\rho(E)$ et \mathcal{A}_{ω_0} par leurs valeurs, nous trouvons :

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{1}{8\pi^2 \epsilon_0 \hbar c^3} \frac{\omega_0^3}{d^2} (\epsilon \cdot \mathbf{e}_z)^2 \quad (12)$$

Pour trouver la probabilité d'émission d'un photon dans une direction et avec une polarisation quelconques, il faut sommer sur ϵ et intégrer sur $d\Omega$, ce qui donne, compte tenu de la relation (55) du complément A_I :

$$\Gamma = \frac{1}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3} \frac{\omega_0^3}{d^2} \quad (13)$$

d) Remplaçons d par $q a_0$ où a_0 est le rayon de Bohr. Il vient :

$$\frac{1}{\omega_0 \tau} \sim \frac{q^2}{3\pi \epsilon_0 \hbar c} \frac{\omega_0^2 a_0^2}{c^2} \sim \alpha \frac{\omega_0^2 a_0^2}{c^2} \quad (14)$$

Or, dans l'atome d'hydrogène, $\omega_0 a_0 / c \sim \alpha$, ce qui donne :

$$\frac{1}{\omega_0 \tau} \sim \alpha^3 \quad (15)$$

Nous en concluons que la durée de vie du niveau excité est beaucoup plus longue, par le facteur $(1/\alpha)^3$, que le temps d'évolution caractéristique d'un électron en mouvement autour du noyau. La relation (15) exprime également que la largeur de la transition, de l'ordre de $1/\tau$, est très petite devant la fréquence d'émission ω_0 .

e) En comparant (13) à (4) et (3), nous voyons que

$$f_{ab} = \frac{2m\omega_0}{\hbar} \frac{d^2}{q^2} \quad (16)$$

soit encore, en revenant à la définition de $d = q \langle a | z | b \rangle$:

$$f_{ab} = \frac{2m\omega_0}{\hbar} |\langle a | z | b \rangle|^2 \quad (17)$$

2. ÉMISSION SPONTANÉE PAR UN ION PIÉGÉ. EFFET LAMB-DICKE

Le but de cet exercice est d'étudier la structure des raies émises par un système atomique excité dont le mouvement du centre de masse n'est pas libre, mais confiné dans une région finie de l'espace par un potentiel $V(\mathbf{R})$. Ce type de situation apparaît dans divers contextes : rayonnement d'un noyau lié dans une matrice cristalline (effet Mössbauer), d'un atome ou d'une molécule dont le libre parcours moyen est petit devant la longueur d'onde du rayonnement émis (effet Dicke) (*)... Nous considérons ici l'émission spontanée d'un ion placé dans un piège.

L'état de l'ion peut être développé sur une base $|i\rangle \otimes |\chi\rangle$ où $|i\rangle$ correspond aux degrés de liberté internes (excitation des électrons dans le référentiel du centre de masse) et $|\chi\rangle$ aux degrés de liberté externes (relatifs au centre de masse). On supposera, pour simplifier, qu'il s'agit d'un ion hydrogénoidé composé d'un électron de charge $q_1 = q$ et de masse m_1 et d'un noyau de charge $q_2 = -Zq$ et de masse m_2 . Les charge et masse totales sont $Q = (1 - Z)q$ et $M = m_1 + m_2$. Les variables du centre de masse \mathbf{R} et \mathbf{P} et les variables internes \mathbf{r} et \mathbf{p} sont reliées aux variables des deux particules par les équations :

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.a)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad (1.b)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (1.c)$$

$$\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \quad (1.d)$$

où m est la masse réduite :

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (2)$$

a) Montrer qu'à l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'hamiltonien en jauge de Coulomb pour un ion libre est :

$$H = H_0 + \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + V_{int} + V_{ext} + H_R \quad (3)$$

où H_R est l'hamiltonien propre du rayonnement et où

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \epsilon_{Coul} \quad (4.a)$$

(*) Voir par exemple : A. Abragam, « l'Effet Mössbauer » Gordon and Breach (1964) ; R.H. Dicke, Phys. Rev. **89**, 472 (1953).

$$V_{int} = -\frac{q}{\mu} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (4.b)$$

$$V_{ext} = -\frac{Q}{M} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) + \left(\frac{q^2}{2m_1} + \frac{Z^2 q^2}{2m_2} \right) \mathbf{A}^2(\mathbf{R}) \quad (4.c)$$

Nous avons appelé ϵ_{Coul} la somme des énergies propres coulombiennes et posé

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{Z}{m_2} \quad (5)$$

b) Le centre de masse de l'ion est supposé évoluer dans un potentiel extérieur $V(\mathbf{R})$ de sorte que le nouvel hamiltonien est $H + V(\mathbf{R})$. $V(\mathbf{R})$ est supposé être attractif et avoir un minimum en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ de telle façon que les états propres de l'hamiltonien

$$H_{ext} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + V(\mathbf{R}) \quad (6)$$

soient des états liés discrets $|\chi_n\rangle$ d'énergie \mathcal{E}_n .

A l'instant initial, l'ion est dans un niveau électronique excité $|b\rangle$ en l'absence de photons. Son vecteur d'état est $|b, \chi_n; 0\rangle$ où $|\chi_n\rangle$ décrit l'état d'excitation vibrationnelle initial du centre de masse. Après émission spontanée d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$, l'ion aboutit dans son niveau électronique fondamental $|a\rangle$. Montrer que l'amplitude de transition associée à un processus où l'état final d'excitation vibrationnelle est $|\chi_l\rangle$ est proportionnelle à $\langle a | \mathbf{p} \cdot \epsilon | b \rangle \langle \chi_l | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} | \chi_n \rangle$.

c) Calculer les fréquences des photons émis spontanément dans une direction donnée \mathbf{k}_0 par un ion supposé initialement dans l'état $|b, \chi_n\rangle$, ainsi que les intensités relatives des raies correspondantes. On supposera $|\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l| \ll \hbar\omega_0$ où $\hbar\omega_0 = E_b - E_a$ et on posera

$$I_{nl}(\mathbf{k}_0) = |\langle \chi_l | e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_n \rangle|^2 \quad (7)$$

où $\mathbf{k}_0 = (\omega_0/c)\mathbf{k}_0$.

Montrer que l'intensité totale émise sur toutes ces raies est indépendante de $V(\mathbf{R})$ et est donc égale à l'intensité totale émise par un ion libre.

Montrer que, dans le cas où l'extension spatiale D du mouvement du centre de masse est très petite devant la longueur d'onde du rayonnement émis, la raie de fréquence ω_0 est beaucoup plus intense que les autres raies (effet Dicke).

d) L'émission d'un photon sur la transition $b, \chi_n \rightarrow a, \chi_l$ fait varier l'énergie de vibration de l'ion. Montrer que, pour un ion partant de l'état b, χ_n et émettant un photon dans la direction \mathbf{k}_0 , la valeur

moyenne $\delta\mathcal{E}$ de cette variation d'énergie est égale à

$$\delta\mathcal{E} = \langle \chi_n | e^{ik_0 \cdot R} H_{ext} e^{-ik_0 \cdot R} - H_{ext} | \chi_n \rangle \quad (8)$$

En utilisant le fait que la valeur moyenne de \mathbf{P} dans l'état lié $|\chi_n\rangle$ est nulle, montrer que $\delta\mathcal{E}$ coïncide avec l'énergie de recul d'un ion libre.

La différence d'énergie entre niveaux de vibration $|\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_n|$ avec $l \neq n$ est supposée très grande devant $\delta\mathcal{E}$. Que peut-on en déduire pour l'intensité de la raie non déplacée de fréquence ω_0 ?

Solution

a) Partons de l'hamiltonien en jauge de Coulomb

$$H = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \sum_{\alpha > \beta} \frac{q_{\alpha} q_{\beta}}{4\pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} + \sum_{\alpha} \epsilon_{Coul}^{\alpha} - \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_{\alpha}) + H_R \quad (9)$$

A l'approximation des grandes longueurs d'onde, $\mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})$ peut être remplacé par $\mathbf{A}(\mathbf{R})$. Le terme d'interaction avec le champ, linéaire en q_{α} , devient alors

$$- \left(\frac{q}{m_1} \mathbf{p}_1 - \frac{Zq}{m_2} \mathbf{p}_2 \right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) = -q \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{Z\mathbf{p}_2}{m_2} \right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (10)$$

Réexprimons \mathbf{p}_1 et \mathbf{p}_2 en fonction de \mathbf{p} et \mathbf{P} à l'aide de (1.b) et (1.d) :

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p} + \frac{m_1}{M} \mathbf{P} \quad (11.a)$$

$$\mathbf{p}_2 = -\mathbf{p} + \frac{m_2}{M} \mathbf{P} \quad (11.b)$$

Les termes d'interaction linéaires en q sont

$$-q \left(\frac{1}{m_1} + \frac{Z}{m_2} \right) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \frac{Q}{M} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (12)$$

qui correspondent respectivement à V_{int} et au premier terme de V_{ext} . Le second terme de V_{ext} s'obtient directement à partir de (9), lors du remplacement de $\mathbf{A}^2(\mathbf{r}_{\alpha})$ par $\mathbf{A}^2(\mathbf{R})$.

En utilisant finalement la relation :

$$\sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}^2}{2M} \quad (13)$$

nous retrouvons, après avoir regroupé les termes, la forme (3) de l'hamiltonien.

b) Les états $|b, \chi_n; 0\rangle$ et $|a, \chi_l; k\epsilon\rangle$ sont des états propres de $H_0 + H_{ext} + H_R$ d'énergie $E_b + \mathcal{E}_n$ et $E_a + \mathcal{E}_l + \hbar ck$ respectivement. Le seul terme de l'hamiltonien couplant ces états est V_{int} (V_{ext} ne dépendant pas des variables internes, les éléments de matrice de V_{ext} entre $|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont nuls). En utilisant la décomposition de \mathbf{A} en a et

a^* (voir Appendice, formule (21)), nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle a, \chi_1 | \mathbf{k} \cdot \mathbf{e} | V_{int} | b, \chi_n \rangle &= \\ = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega (2\pi)^3}} \left(-\frac{q}{\mu} \right) \langle a | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | b \rangle \langle \chi_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} | \chi_n \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

c) La condition de conservation de l'énergie entraîne que le photon émis a une fréquence

$$\omega = \omega_0 + \frac{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l}{\hbar} \quad (15)$$

Par suite de la discréttisation des niveaux associés au mouvement du centre de masse, le spectre d'émission spontanée possède une structure vibrationnelle (voir figure 1).

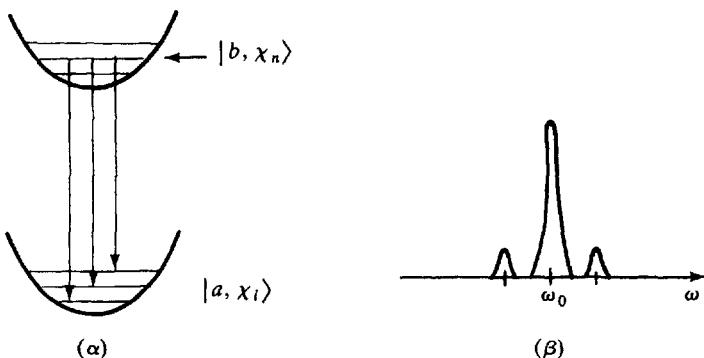


Figure 1 : α- Schéma des transitions possibles à partir du niveau excité $|b, \chi_n\rangle$. β- Allure du spectre d'émission dans le cas où $|\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l| \gg \hbar\Gamma$ (largeur radiative de la transition).

Puisque $|\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l| \ll \hbar\omega_0$, la densité d'états du champ électromagnétique varie peu d'une raie émise à l'autre et la probabilité d'émission d'un photon sur la raie $|b, \chi_n\rangle \rightarrow |a, \chi_l\rangle$ est proportionnelle au carré du module de (14), le seul terme dépendant des variables du centre de masse étant $I_n(\kappa_0)$.

Comme $|\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l| \ll \hbar\omega_0$, nous négligerons également la variation du module du vecteur d'onde \mathbf{k} selon le niveau vibrationnel final et remplacerons \mathbf{k} par \mathbf{k}_0 puisqu'on s'intéresse à l'émission dans la direction κ_0 . Calculons alors $\sum_l I_n(\kappa_0)$. Il vient :

$$\begin{aligned} \sum_l I_n(\kappa_0) &= \sum_l \langle \chi_n | e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_l \rangle \langle \chi_l | e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_n \rangle \\ &= \langle \chi_n | \chi_n \rangle = 1 \end{aligned} \quad (16)$$

(nous avons utilisé la relation de fermeture $\sum_l | \chi_l \rangle \langle \chi_l | = 1$). La condition de normalisation (16) montre que $I_n(\kappa_0)$ peut être considéré comme la probabilité pour que l'atome passe de $|b, \chi_n\rangle$ à $|a, \chi_l\rangle$ en émettant un photon de fréquence $\omega_0 + (\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_l)/\hbar$ dans la direction κ_0 , avec une polarisation quelconque (I_n est en effet indépendant de ϵ). La condition (16) montre également que l'intensité totale émise dans

la direction κ_0 est indépendante des nombres quantiques externes et donc de $V(\mathbf{R})$.

Dans le cas où $|k_0 D| \ll 1$, $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}}$ peut en première approximation être remplacé par 1. $I_{nl}(\kappa_0)$ est alors proche de

$$I_{nl}(\kappa_0) \simeq |\langle \chi_l | \chi_n \rangle|^2 = \delta_{nl} \quad (17)$$

Dans ce cas, la transition où l'excitation vibrationnelle ne change pas ($n = l$) est bien plus intense que les autres transitions. La fréquence centrale pour cette raie coïncide avec ω_0 et n'est pas déplacée.

d) Pour obtenir $\delta\mathcal{E}$, il faut pondérer $(\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_n)$ par la probabilité $I_{nl}(\kappa_0)$ de la transition correspondante, puis sommer sur tous les états finals χ_l possibles

$$\delta\mathcal{E} = \sum_l (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_n) I_{nl}(\kappa_0) \quad (18)$$

En écrivant $I_{nl}(\kappa_0) = \langle \chi_n | e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_l \rangle \langle \chi_l | e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_n \rangle$, nous trouvons

$$\delta\mathcal{E} = \sum_l \langle \chi_n | e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} | \chi_l \rangle \langle \chi_l | [H_{ext}, e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}}] | \chi_n \rangle \quad (19)$$

expression que l'on simplifie à l'aide de la relation de fermeture sur $|\chi_l\rangle$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{E} &= \langle \chi_n | e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} [H_{ext}, e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}}] | \chi_n \rangle \\ &= \langle \chi_n | e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} H_{ext} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} - H_{ext} | \chi_n \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

Or, $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}}$ est un opérateur de translation, d'une quantité $-\hbar\mathbf{k}_0$, dans l'espace des impulsions. Nous pouvons donc réécrire (20) sous la forme :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{E} &= \langle \chi_n | \frac{1}{2M} (\mathbf{P} - \hbar\mathbf{k}_0)^2 + V(\mathbf{R}) - \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - V(\mathbf{R}) | \chi_n \rangle \\ &= \langle \chi_n | \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_0^2}{2M} - \frac{\hbar\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{P}}{M} | \chi_n \rangle \end{aligned} \quad (21)$$

Comme la valeur moyenne de \mathbf{P} dans l'état lié $|\chi_n\rangle$ est nulle, on obtient

$$\delta\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_0^2}{2M} \quad (22)$$

qui est bien l'énergie de recul d'un ion libre. Nous constatons également que, en moyenne, l'énergie de vibration augmente au cours du processus d'émission spontanée (et ceci quel que soit l'état initial de vibration). Notons que $\delta\mathcal{E}$ est indépendant de κ_0 et reste donc égal à l'énergie de recul lorsqu'on moyenne sur la direction d'émission du photon.

Si $\delta\mathcal{E} \ll |\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_n|$ pour tout $l \neq n$, il faut, pour satisfaire l'égalité (18), que la raie associée à l'émission d'un photon non déplacé ω_0 soit bien plus intense que les autres raies. La condition $|\delta\mathcal{E}| \ll |\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_n|$ pour $l \neq n$ signifie que l'ion émetteur est très rigidement lié dans le piège. Il ne peut pas encaisser tout seul le recul lié à l'émission du photon. C'est le système global « ion + piège » qui subit le recul. Ceci montre l'analogie très étroite entre ce phénomène et l'émission, sans effet de recul, d'un photon γ par un noyau rigidement lié dans un potentiel cristallin (effet Mössbauer).

3. DIFFUSION RAYLEIGH

Le but de l'exercice est de calculer la section efficace de diffusion d'un photon par un système atomique à la limite où l'énergie $\hbar\omega$ du photon est très petite devant les énergies d'excitation ($E_b - E_a$), a désignant le niveau fondamental et b les niveaux excités. On supposera le système placé à l'origine des coordonnées et on fera l'approximation des grandes longueurs d'onde, de sorte que l'on pourra utiliser l'hamiltonien d'interaction dipolaire électrique $H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})$ (voir Appendice, § 5).

a) L'état initial du système étant $|\varphi_i\rangle = |a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ (atome dans l'état fondamental en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$), calculer l'élément de la matrice de transition \mathcal{T}_{fi} à l'ordre 2 en H'_I entre les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle = |a; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$. On calculera \mathcal{T}_{fi} à l'ordre zéro en $\hbar\omega/(E_b - E_a)$ et on exprimera le résultat en fonction du tenseur de polarisabilité statique α_{mn} du système atomique :

$$\alpha_{mn} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_b \frac{\langle a | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_n | b \rangle \langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_m | a \rangle + \langle a | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_m | b \rangle \langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_n | a \rangle}{E_a - E_b} \quad (1)$$

où $\mathbf{d} \cdot \mathbf{e}_m$ est la composante du dipôle atomique \mathbf{d} le long de la direction $0m$ ($m = x, y, z$).

b) Calculer la section efficace différentielle de diffusion d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ dans un angle solide $d\Omega'$ autour de \mathbf{k}' avec la polarisation ϵ' . Pour cela, on calculera au préalable la probabilité de transition par unité de temps vers tous les états finals détectés.

c) On considère la situation habituelle en physique atomique où le tenseur de polarisabilité statique est isotrope ($\alpha_{mn} = \alpha_0 \delta_{mn}$). Que valent dans ce cas la section efficace différentielle et la section efficace totale ? Comparer ce dernier résultat à celui

$$\sigma_{cl} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 \quad (2)$$

obtenu (*) pour un électron classique élastiquement lié dont la fréquence de résonance est ω_0 ($r_0 = q^2/4\pi\varepsilon_0 mc^2$ est le rayon classique de l'électron). Pour cela, on exprimera α_0 en fonction de la force d'oscillateur définie par :

$$f_{ab} = \frac{2m(E_b - E_a)}{\hbar^2} |\langle a | z | b \rangle|^2 \quad (3)$$

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément C_I .

Solution

a) L'état intermédiaire du processus de diffusion est, soit un état à 0 photon $|b;0\rangle$, soit un état à deux photons $|b;\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$. Les éléments de matrice de H'_I entre ces états et $|\varphi_i\rangle$ peuvent être calculés à partir du développement de $\mathbf{E}_\perp(0)$ en modes (voir Appendice, formule (89)) :

$$\langle b;0|H'_I|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0L^3}} \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}|a\rangle \quad (4.a)$$

$$\langle b;\mathbf{k}\epsilon, \mathbf{k}'\epsilon'|H'_I|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle = i \sqrt{\frac{\hbar\omega'}{2\epsilon_0L^3}} \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}'|a\rangle \quad (4.b)$$

Dans le développement de Born de \mathcal{C}_{fi} (voir chapitre I, formule (B.14)), nous ne conservons que le terme d'ordre 2 (le terme d'ordre 1 est bien entendu nul puisque H'_I ne couple pas directement $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ et $|a;\mathbf{k}'\epsilon'\rangle$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{fi} = & \frac{\hbar}{2\epsilon_0L^3} \sqrt{\omega\omega'} \sum_b \left[\frac{\langle a|\mathbf{d}.\mathbf{e}'|b\rangle \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}|a\rangle}{E_a + \hbar\omega - E_b} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle a|\mathbf{d}.\mathbf{e}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}'|a\rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega'} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

A la limite des basses fréquences, c'est-à-dire pour $\hbar\omega, \hbar\omega' \ll (E_b - E_a)$, l'expression précédente peut être approximée par :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{fi} = & \frac{\hbar}{2\epsilon_0L^3} \sqrt{\omega\omega'} \times \\ & \times \sum_b \left[\frac{\langle a|\mathbf{d}.\mathbf{e}'|b\rangle \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}|a\rangle + \langle a|\mathbf{d}.\mathbf{e}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}.\mathbf{e}'|a\rangle}{E_a - E_b} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

que l'on peut encore écrire

$$\mathcal{C}_{fi} = -\frac{\hbar}{2L^3} \sqrt{\omega\omega'} \sum_{m,n} \alpha_{mn}(\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_m)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}_n) \quad (7)$$

b) En utilisant les formules (47) et (51) du complément A₁ (la dernière formule étant généralisée au cas d'un couplage indirect), nous obtenons pour la probabilité de transition par unité de temps et d'angle solide :

$$\frac{\delta w_{fi}}{\delta \Omega'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2L^3} \sqrt{\omega\omega'} \right)^2 \left(\sum_{m,n} \alpha_{mn}(\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_m)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}_n) \right)^2 \frac{L^3}{8\pi^3} \frac{(\hbar ck')^2}{\hbar^3 c^3} \quad (8)$$

soit encore, puisque la conservation de l'énergie impose $\omega = \omega'$

$$\frac{\delta w_{fi}}{\delta \Omega'} = \frac{\omega^4}{16\pi^2 c^3 L^3} \left(\sum_{m,n} \alpha_{mn}(\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_m)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}_n) \right)^2 \quad (9)$$

La section efficace différentielle est obtenue en divisant (9) par le flux de photons égal à c/L^3 (voir complément A₁, formule (57)) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = \frac{\omega^4}{16\pi^2 c^4} \left[\sum_{m,n} \alpha_{mn}(\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}_m)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}_n) \right]^2 \quad (10)$$

La section efficace différentielle varie comme ω^4 . Elle est d'autant plus grande que la fréquence est plus grande. Par exemple, pour la partie visible du spectre, les longueurs d'onde bleues sont plus diffusées que les rouges.

c) Remplaçons α_{mn} par $\alpha_0 \delta_{mn}$ dans (10). Il vient

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = \frac{\omega^4}{16\pi^2 c^4} \alpha_0^2 \left(\sum_n (\epsilon' \cdot \epsilon_n)(\epsilon \cdot \epsilon_n) \right)^2 = \frac{\omega^4}{16\pi^2 c^4} \alpha_0^2 (\epsilon \cdot \epsilon')^2 \quad (11)$$

Pour calculer la section efficace totale, choisissons la direction $0z$ le long de ϵ . Il faut ensuite effectuer la sommation sur ϵ' perpendiculaire à ϵ' et la moyenne angulaire. En utilisant la relation (54) du complément A_I , nous trouvons :

$$\sigma = \frac{\omega^4}{16\pi^2 c^4} \alpha_0^2 \int d\Omega (1 - \cos^2 \theta) = \frac{\omega^4}{6\pi c^4} \alpha_0^2 \quad (12)$$

Pour calculer α_0 , exprimons le carré de l'élément de matrice $|\langle a | z | b \rangle|^2$ en fonction de la force d'oscillateur

$$\alpha_0 = -\frac{2q^2}{\epsilon_0} \sum_b \frac{|\langle a | z | b \rangle|^2}{E_a - E_b} = \frac{q^2}{\epsilon_0 m} \sum_b \frac{f_{ab}}{\omega_{ab}^2} \quad (13)$$

En reportant cette valeur de α_0 dans (12), nous trouvons l'expression

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \left(\sum_b f_{ab} \frac{\omega^2}{\omega_{ab}^2} \right)^2 \quad (14)$$

qui peut être réécrite sous la forme (2) à condition de poser

$$\frac{1}{\omega_0^2} = \sum_b \frac{f_{ab}}{\omega_{ab}^2}$$

Comme $\sum_b f_{ab} = 1$ d'après la règle de somme de Reiche-Thomas-Kuhn, $1/\omega_0^2$ peut être considéré comme la moyenne des quantités $1/\omega_{ba}^2$ relatives aux diverses transitions $a \rightarrow b$ partant de a , pondérées par les forces d'oscillateur correspondantes.

Remarque sur le choix de l'hamiltonien d'interaction

Les calculs faits dans cet exercice utilisent l'hamiltonien dipolaire électrique. Il est également possible d'utiliser l'hamiltonien en jauge de Coulomb

$$-\frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(0) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2(0) \quad (15)$$

Nous savons par des arguments généraux (voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément E_{IV}) que les résultats obtenus sont les mêmes dans les deux points de vue. Ce résultat peut être également vérifié directement dans le cas de la diffusion Rayleigh. T_{fi} apparaît alors comme la somme de deux termes, le premier semblable à (5), mais où les éléments de matrice de \mathbf{d} sont remplacés par ceux de \mathbf{p} , le second provenant du terme en \mathbf{A}^2 qui couple directement $|\varphi_i\rangle$ à $|\varphi_f\rangle$. Si, dans la somme sur les niveaux intermédiaires, on néglige $\hbar\omega$ devant $(E_b - E_a)$ au dénominateur, on trouve un résultat nul, le terme en \mathbf{A}^2 compensant exactement la sommation sur b (pour vérifier ce point, il faut remplacer $\langle b | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | a \rangle$ par $(m/i\hbar)(E_a - E_b) \langle b | \mathbf{r} \cdot \mathbf{e} | a \rangle$ de façon à pouvoir introduire la relation de fermeture sur b). Ceci prouve que l'approximation faite avec l'hamiltonien dipolaire électrique ne peut être utilisée aussi sommairement avec l'hamiltonien en jauge de Coulomb. Il faut en fait dans ce point de vue poursuivre le développement des dénominateurs d'énergie $(E_a + \hbar\omega - E_b)^{-1}$ et

$(E_a - \hbar\omega - E_b)^{-1}$ aux ordres supérieurs en $\hbar\omega/(E_b - E_a)$. Pour le terme d'ordre 1 vis à vis de cette quantité, on peut remplacer tous les éléments de matrice de $\mathbf{p}.\mathbf{e}$ en fonction de ceux de $\mathbf{r}.\mathbf{e}$, introduire une relation de fermeture et montrer qu'il est nul. C'est en fait le terme d'ordre 2 en $\hbar\omega/(E_b - E_a)$ du développement qui coïncide avec (6). Le calcul fait à partir de l'hamiltonien en jauge de Coulomb est donc, pour ce problème, plus long (tout en conduisant bien sûr au même résultat).

4. DIFFUSION THOMSON

Le but de cet exercice est de calculer la section efficace de diffusion élastique d'un photon par un électron atomique à la limite où l'énergie des photons $\hbar\omega$ est grande devant l'énergie d'ionisation E_I de l'atome ($\hbar\omega \gg E_I$). En revanche, on supposera que $\hbar\omega$ est petit devant αmc^2 (où α est la constante de structure fine), de sorte que l'approximation des grandes longueurs d'onde puisse être appliquée.

a) Le système, placé à l'origine des coordonnées, est supposé initialement dans l'état $|\varphi_i\rangle = |a; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ (atome dans l'état fondamental $|a\rangle$ en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$). On se propose de calculer l'élément de la matrice de transition \mathcal{T}_{fi} à l'ordre 2 en q entre les états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle = |a; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle$. Pour cela, on utilisera l'hamiltonien d'interaction en jauge de Coulomb

$$H_I = H_{I1} + H_{I2} \quad (1)$$

avec $H_{I1} = -(q/m) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0})$ et $H_{I2} = q^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{0})/2m$. Calculer les contributions de H_{I1} et H_{I2} à \mathcal{T}_{fi} (on notera b les états excités de l'hamiltonien atomique).

b) Montrer que la condition $\hbar\omega \gg E_I$ entraîne que la contribution de H_{I1} à \mathcal{T}_{fi} est petite devant celle de H_{I2} .

c) En ne retenant que la contribution de H_{I2} à \mathcal{T}_{fi} , calculer la section efficace différentielle de diffusion d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ dans un angle solide $d\Omega'$ autour de \mathbf{k}' et avec la polarisation ϵ' . Calculer la section efficace totale et montrer que ce résultat coïncide avec celui obtenu pour un électron classique élastiquement lié (*)

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \quad (2)$$

r_0 étant le rayon classique de l'électron ($r_0 = q^2/4\pi\epsilon_0 mc^2$).

Solution

a) En utilisant le développement de $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ en modes (voir Appendice, formule (28)), nous trouvons

$$H_{I2} = \frac{q^2}{2m} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3} \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \sum_{\mathbf{k}', \epsilon'} \frac{1}{\sqrt{\omega \omega'}} (\epsilon \cdot \epsilon') (a_{\mathbf{k}\epsilon} + a_{\mathbf{k}\epsilon}^\dagger) (a_{\mathbf{k}'\epsilon'} + a_{\mathbf{k}'\epsilon'}^\dagger) \quad (3)$$

qui contient des termes en $a_{\mathbf{k}\epsilon} a_{\mathbf{k}'\epsilon'}^\dagger$ et $a_{\mathbf{k}'\epsilon'}^\dagger a_{\mathbf{k}\epsilon}$ couplant directement $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$. Nous

(*) Voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément C_j.

en déduisons que la contribution $\mathcal{T}_{fi}^{(2)}$ de H_{I_2} à \mathcal{T}_{fi} est égale à :

$$\mathcal{T}_{fi}^{(2)} = \frac{q^2}{2m} \frac{\hbar}{\epsilon_0 L^3 \sqrt{\omega \omega'}} (\epsilon \cdot \epsilon') \quad (4)$$

Calculons maintenant la contribution au second ordre de H_{I_1} . L'état intermédiaire du processus peut être un état à 0 photon $|b;0\rangle$ ou un état à deux photons $|b;k\epsilon, k'\epsilon'\rangle$, de sorte que la contribution $\mathcal{T}_{fi}^{(1)}$ de H_{I_1} à la matrice de transition est égale à :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{fi}^{(1)} = & \frac{q^2}{m^2} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \sqrt{\omega \omega'}} \sum_b \left[\frac{\langle a | p \cdot \epsilon' | b \rangle \langle b | p \cdot \epsilon | a \rangle}{E_a + \hbar\omega - E_b + i\epsilon} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle a | p \cdot \epsilon | b \rangle \langle b | p \cdot \epsilon' | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega'} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

où $\omega' = \omega$ par conservation de l'énergie.

b) Les niveaux b pour lesquels l'élément de matrice $\langle a | p \cdot \epsilon | b \rangle$ est suffisamment important pour donner une contribution significative à (5) sont tels que $|E_b - E_a| \sim E_I \ll \hbar\omega$. Si on néglige alors $(E_b - E_a)$ devant $\hbar\omega$ et $-\hbar\omega'$ ($= -\hbar\omega$), les deux termes de (5) se compensent exactement. Pour trouver l'ordre de grandeur de $\mathcal{T}_{fi}^{(1)}$, il faut donc poursuivre le développement à un ordre supérieur en $(E_b - E_a)/\hbar\omega$. Nous trouvons ainsi

$$\mathcal{T}_{fi}^{(1)} \sim \frac{q^2}{m^2} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \sqrt{\omega \omega'}} \sum_b \frac{(E_b - E_a) |\langle a | p \cdot \epsilon | b \rangle|^2}{\hbar^2 \omega^2} \quad (6)$$

En remplaçant $(E_b - E_a)$ par E_I au numérateur et en utilisant ensuite la relation de fermeture sur b , nous obtenons

$$\mathcal{T}_{fi}^{(1)} \sim \frac{q^2}{m} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \sqrt{\omega \omega'}} \frac{E_I}{\hbar\omega} \frac{\langle a | \frac{p^2}{m} | a \rangle}{\hbar\omega} \quad (7)$$

Or, $\langle a | (p^2/m) | a \rangle$ est le double de l'énergie cinétique moyenne du niveau fondamental, quantité qui est de l'ordre de grandeur de E_I . En définitive, la comparaison de (4) et (7) montre que :

$$\mathcal{T}_{fi}^{(1)} \sim \mathcal{T}_{fi}^{(2)} \left(\frac{E_I}{\hbar\omega} \right)^2 \quad (8)$$

$\mathcal{T}_{fi}^{(2)}$ est donc plus grand que $\mathcal{T}_{fi}^{(1)}$ par un facteur de l'ordre de $(\hbar\omega/E_I)^2$.

c) Pour calculer la section efficace différentielle, nous procédons comme dans l'exercice 3 (question b). La probabilité de transition par unité de temps et d'angle solide est égale à :

$$\begin{aligned} \frac{\delta w_{fi}}{d\Omega'} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{q^2}{2m} \frac{\hbar}{\epsilon_0 L^3 \omega} \right)^2 (\epsilon \cdot \epsilon')^2 \frac{L^3}{8\pi^3} \frac{(\hbar c k)^2}{\hbar^3 c^3} \\ &= \frac{e^4}{m^2 c^3 L^3} (\epsilon \cdot \epsilon')^2 \end{aligned} \quad (9)$$

où $e^2 = q^2/4\pi\epsilon_0$. Nous en déduisons, après division par le flux de photons égal à c/L^3 , la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega'} = r_0^2 (\epsilon \cdot \epsilon')^2 \quad (10)$$

Pour trouver la section efficace totale, il faut sommer $(\epsilon \cdot \epsilon')^2$ sur les deux polarisations orthogonales à \mathbf{k}' et faire la moyenne angulaire. Un tel calcul a été fait dans l'exercice 3 (question c) et donne $8\pi/3$. La section efficace totale est donc la même que celle obtenue en électrodynamique classique pour un électron élastiquement lié.

Remarque sur le choix de l'hamiltonien d'interaction

Il est évidemment possible de retrouver (2) en utilisant l'hamiltonien dipolaire électrique. Les calculs sont cependant un peu plus délicats. Il n'y a pas de couplage direct entre $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ et \mathcal{C}_{fi} , sur la couche d'énergie, est égal à

$$\mathcal{C}_{fi} = \frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3} \sum_b \left[\frac{\langle a | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}' | b \rangle \langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega - E_b + i\epsilon} + \frac{\langle a | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | b \rangle \langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e}' | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega'} \right] \quad (11)$$

On voit que si l'on néglige $E_b - E_a$ devant $\hbar\omega$ dans les dénominateurs d'énergie, les deux termes du crochet se compensent exactement puisque $\omega' = \omega$. Il faut donc poursuivre le développement des dénominateurs d'énergie à l'ordre suivant en $(E_b - E_a)/\hbar\omega$. En remplaçant alors $(E_a - E_b) \langle b | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | a \rangle$ par $(i\hbar q/m) \langle b | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | a \rangle$, on peut introduire la relation de fermeture sur b et aboutir ainsi à une valeur pour \mathcal{C}_{fi} identique à celle trouvée directement avec H_{f2} (formule (4) avec $\omega = \omega'$).

5. DIFFUSION RÉSONNANTE

On considère un atome A dont le centre de masse est supposé fixe en un point 0, pris pour origine. Soient $|a\rangle$ l'état fondamental de cet atome, $|b\rangle$ le premier état excité, supposés tous les deux non dégénérés. La fréquence de Bohr de la transition $b \leftrightarrow a$ est notée ω_0 . Pour simplifier, seule la composante d_z de l'opérateur dipolaire électrique de l'atome est supposée avoir un élément de matrice non nul entre a et b . Il sera supposé réel et noté d_{ba}

$$\langle b | d_z | a \rangle = d_{ba} \quad (1.a)$$

$$\langle b | d_x | a \rangle = \langle b | d_y | a \rangle = 0 \quad (1.b)$$

Le taux d'émission spontanée à partir de l'état b vaut (voir exercice 1) :

$$\Gamma = \frac{1}{3\pi} \left(\frac{\omega_0}{c} \right)^3 \frac{d_{ba}^2}{\varepsilon_0 \hbar} \quad (2)$$

On considère un photon de vecteur d'onde \mathbf{k} , de polarisation ϵ , dont la fréquence ω est proche de la fréquence de résonance ω_0 . La probabilité de transition par unité de temps pour que le système passe de l'état initial

$$|\varphi_i\rangle = |a; \mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (3.a)$$

à l'état final

$$|\varphi_f\rangle = |a; \mathbf{k}'\epsilon'\rangle \quad (3.b)$$

est égale à (formule (B.18) du chapitre I) :

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{C}_{fi}|^2 \delta^{(T)}(E_f - E_i) \quad (4)$$

où \mathcal{C}_{fi} est donnée par l'expression (C.5) du chapitre II :

$$\mathcal{C}_{fi} = \frac{\langle a; \mathbf{k}'\epsilon' | H'_I | b; 0 \rangle \langle b; 0 | H'_I | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle}{\hbar\omega - \hbar\omega_0 + i\hbar \frac{\Gamma}{2}} \quad (5)$$

H'_I est l'hamiltonien d'interaction à l'approximation des grandes longueurs d'onde dans le point de vue dipolaire électrique (voir Appendice, formule (91))

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \quad (6)$$

- a) Calculer explicitement \mathcal{C}_{fi} . Etudier la variation de son amplitude et de sa phase au voisinage de la résonance.
- b) Montrer que la section efficace différentielle de diffusion d'un

photon $\mathbf{k}\epsilon$ dans un angle solide $d\Omega'$ autour de la direction $\mathbf{k}'\epsilon'$, avec une polarisation ϵ' (perpendiculaire à \mathbf{k}') s'écrit :

$$\sigma(\mathbf{k}\epsilon \rightarrow \mathbf{k}'\epsilon') = \frac{9}{16\pi^2} \lambda_0^2 \epsilon_z'^2 \epsilon_z^2 \frac{(\Gamma/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (7)$$

avec $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$.

c) Montrer qu'à résonance, la section efficace totale de diffusion d'un photon de polarisation ϵ_z est de l'ordre de λ_0^2 , avec un coefficient numérique que l'on précisera.

Solution

a) D'après l'expression (6) de H'_I , celle de $\mathbf{E}_\perp(0)$ (Appendice, formule (89)) et les relations (1.a) et (1.b), il vient :

$$\langle b;0 | H'_I | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3}} \langle b | \epsilon \cdot \mathbf{d} | a \rangle = -i \epsilon_z \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3}} d_{ba} \quad (8)$$

D'où

$$\mathcal{T}_{fi} = \epsilon_z \epsilon_z' \frac{d_{ba}^2}{2\epsilon_0 L^3} \sqrt{\omega \omega'} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i \frac{\Gamma}{2}} \quad (9)$$

L'élément de matrice de transition \mathcal{T}_{fi} est un nombre complexe qui présente une résonance pour $\omega = \omega_0$. Son amplitude est maximum à résonance, et sa phase varie de π à 0 lorsque ω passe par ω_0 . \mathcal{T}_{fi} est imaginaire pur à résonance. Comme on s'intéresse aux fréquences proches de ω_0 , on peut remplacer dans le coefficient du terme résonnant ω et ω' par ω_0 , et remplacer d_{ba}^2 par son expression en fonction de Γ tirée de (2). Il vient :

$$\mathcal{T}_{fi} \approx \frac{3\pi\hbar c^3}{\omega_0^2 L^3} \epsilon_z \epsilon_z' \frac{\Gamma/2}{\omega - \omega_0 + i \frac{\Gamma}{2}} \quad (10)$$

b) Le nombre d'états finals, d'énergie comprise entre $\hbar ck'$ et $\hbar c(k' + dk')$, et dont le vecteur d'onde pointe à l'intérieur de l'angle solide $d\Omega'$ autour de \mathbf{k}' vaut d'après la formule (46) du complément A_I

$$\rho(\hbar ck') \hbar c dk' d\Omega' = \frac{L^3}{8\pi^3} k'^2 dk' d\Omega' \quad (11)$$

Le taux de transition total vers l'ensemble des états finals détectés est donc égal à :

$$\begin{aligned} \sum_f w_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} d\Omega' \int_0^\infty \frac{k'^2 dk'}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} |\mathcal{T}_{fi}|^2 \delta(\hbar ck' - \hbar ck) \\ &= d\Omega' \frac{9}{4} \frac{k^2 c^5}{\omega_0^4 L^3} \epsilon_z^2 \epsilon_z'^2 \frac{(\Gamma/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \end{aligned} \quad (12)$$

De même que précédemment, nous remplaçons ck par ω_0 dans les facteurs précédant le terme résonnant.

L'état initial correspond à un photon dans le volume L^3 , se déplaçant à la vitesse c , soit un flux

$$\phi = \frac{c}{L^3} \quad (13)$$

La section efficace différentielle est finalement :

$$\sigma(\mathbf{k}\epsilon \rightarrow \mathbf{k}'\epsilon') = \frac{\sum w_{fi}}{d\Omega' \phi} = \frac{9}{16\pi^2} \lambda_0^2 \epsilon_i^2 \epsilon'^2_i \frac{(\Gamma/2)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (14)$$

Elle dépend implicitement de \mathbf{k}' par ϵ' , qui est perpendiculaire à \mathbf{k}' .

c) Si l'on ne sélectionne pas la polarisation à la détection, il faut sommer les probabilités correspondant à deux polarisations ϵ'_1 et ϵ'_2 orthogonales entre elles (et à \mathbf{k}'). On obtient (formule (54) du complément A₁)

$$\sum_{i=1,2} \epsilon'^2_{ix} = 1 - \kappa'^2 \quad (15)$$

La section efficace totale de diffusion s'obtient en sommant ensuite la section efficace différentielle sur toutes les directions \mathbf{k}' .

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega' \sum_{i=1,2} \sigma(\mathbf{k}\epsilon_i \rightarrow \mathbf{k}'\epsilon'_i) \quad (16)$$

Sachant que $(\mathbf{e}_z)_z = 1$, et que

$$\int d\Omega' (1 - \kappa'^2) = \frac{8\pi}{3} \quad (17)$$

on obtient, pour $\omega = \omega_0$,

$$\sigma'_{tot} = \frac{3}{2\pi} \lambda_0^2 \quad (18)$$

Ce résultat est identique à celui obtenu pour la diffusion résonnante d'une onde classique par un électron classique élastiquement lié (voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément C₁).

6. DÉTECTION OPTIQUE DU CROISEMENT DE DEUX NIVEAUX ATOMIQUES EXCITÉS (*)

Un atome A , placé à l'origine des coordonnées 0, possède deux états excités $|b\rangle$ et $|c\rangle$, d'énergies E_b et E_c proches l'une de l'autre. Ces niveaux sont reliés à l'état fondamental $|a\rangle$ par des transitions dipolaires électriques caractérisées par les éléments de matrice

$$\mathbf{d}_{ab} = \langle a | \mathbf{d} | b \rangle ; \quad \mathbf{d}_{ac} = \langle a | \mathbf{d} | c \rangle \quad (1)$$

Les états $|b\rangle$ et $|c\rangle$ ont des durées de vie radiatives $1/\Gamma_b$ et $1/\Gamma_c$. On suppose que les énergies E_b et E_c peuvent être modifiées au moyen d'un paramètre extérieur x (un champ magnétique par exemple) et que les niveaux se croisent pour une certaine valeur x_0 du paramètre (fig. 1).

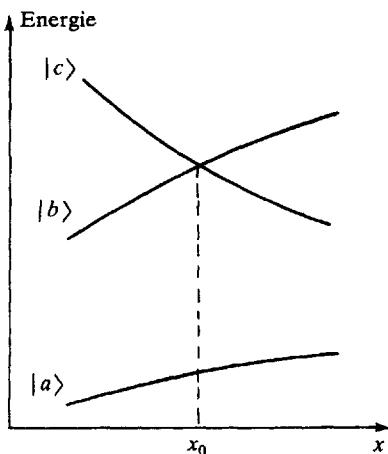


Figure 1. Croisement de deux niveaux excités $|b\rangle$ et $|c\rangle$.

L'atome étant dans l'état $|a\rangle$ en présence d'un photon $\mathbf{k}_1\epsilon_1$, on se propose d'étudier le processus de diffusion résonnante faisant passer le système global de l'état initial $|a;\mathbf{k}_1\epsilon_1\rangle$ à l'état final $|a;\mathbf{k}_2\epsilon_2\rangle$. Du fait de la quasi-résonance du photon incident avec les fréquences de Bohr $\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$ et $\omega_{ca} = (E_c - E_a)/\hbar$, les états $|b\rangle$ et $|c\rangle$ jouent un rôle prépondérant dans la diffusion. Une généralisation évidente de la

(*) Pour l'observation expérimentale de tels effets, voir W. Hanle, Z.f. Phys. 30, 93 (1924) ; P.A. Franken, Phys. Rev. 121, 508 (1961).

formule (C.5) du chapitre II donne pour l'élément de la matrice de transition l'expression :

$$\mathcal{G}_{fi} = \frac{\langle a; \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | H'_I | b; 0 \rangle \langle b; 0 | H'_I | a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 \rangle}{\hbar \omega_1 - \hbar \omega_{ba} + i \hbar (\Gamma_b / 2)} + \\ + \frac{\langle a; \mathbf{k}_2 \epsilon_2 | H'_I | c; 0 \rangle \langle c; 0 | H'_I | a; \mathbf{k}_1 \epsilon_1 \rangle}{\hbar \omega_1 - \hbar \omega_{ca} + i \hbar (\Gamma_c / 2)} \quad (2)$$

où

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(0) \quad (3)$$

est l'hamiltonien d'interaction dipolaire électrique.

- a) Expliciter l'expression de \mathcal{G}_{fi} en fonction de \mathbf{d}_{ab} et \mathbf{d}_{ac} .
- b) En s'inspirant de la démarche de l'exercice 5, montrer que la section efficace de diffusion est la somme de sections efficaces résonnantes $\sigma(b)$ et $\sigma(c)$ relatives aux états b et c , et d'un terme supplémentaire $\delta\sigma$ que l'on calculera.
- c) L'atome A interagit avec un faisceau lumineux de largeur spectrale Δ grande devant Γ_b et Γ_c . Ce faisceau est modélisé par un flux ϕ de photons dont les fréquences sont aléatoirement réparties selon une loi de probabilité $f(\omega)$, centrée en $\omega = \omega_{ba}$ et de largeur Δ avec $\omega_{ba} \gg \Delta \gg \Gamma_b, \Gamma_c$.
 - α) L'intensité lumineuse I , diffusée dans l'angle solide $\delta\Omega_2$ autour de $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_2/k_2$, avec la polarisation ϵ_2 , est décomposée en trois parties $I(b)$, $I(c)$ et δI correspondant respectivement à $\sigma(b)$, $\sigma(c)$ et $\delta\sigma$. Calculer ces trois quantités. Montrer que les deux premières varient peu lorsque E_b et E_c varient sur un intervalle grand devant Γ_b et Γ_c , mais petit devant Δ .
 - β) Montrer que δI varie de façon résonnante, lorsqu'on varie x autour de x_0 . Quelle est la largeur de cette résonance ? A quelles conditions doivent satisfaire les polarisations ϵ_1 et ϵ_2 pour que l'on puisse observer cette résonance ?

Solution

- a) Les éléments de matrice de H'_I sont calculés dans l'exercice 5. On en déduit :

$$\mathcal{G}_{fi} = \frac{\sqrt{\omega_1 \omega_2}}{2 \varepsilon_0 L^3} \left\{ \frac{(\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ab}) (\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ab}^*)}{\omega_1 - \omega_{ba} + i(\Gamma_b / 2)} + \frac{(\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ac}) (\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ac}^*)}{\omega_1 - \omega_{ca} + i(\Gamma_c / 2)} \right\} \quad (4)$$

- b) La section efficace de diffusion s'écrit d'après l'exercice 5

$$\sigma(\mathbf{k}_1 \epsilon_1 \rightarrow \mathbf{k}_2 \epsilon_2) = \frac{\sum_f w_{fi}}{\phi \delta\Omega_2} \quad (5)$$

où $\phi = c/L^3$ et

$$\sum_f w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\Omega_2 \int_0^\infty \frac{k_2^2 dk_2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} |\mathcal{C}_{fi}|^2 \delta(\hbar k_2 - \hbar k_1) \quad (6)$$

Il vient

$$\sigma = \frac{k_1^4}{16\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2} \times \left| \frac{S_b}{\omega_1 - \omega_{ba} + i(\Gamma_b/2)} + \frac{S_c}{\omega_1 - \omega_{ca} + i(\Gamma_c/2)} \right|^2 \quad (7)$$

où

$$S_b = (\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ab})(\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ab}^*) \quad (8.a)$$

$$S_c = (\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ac})(\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ac}^*) \quad (8.b)$$

Le développement du carré du module de la somme fait apparaître

$$\sigma = \sigma(b) + \sigma(c) + \delta\sigma \quad (9)$$

où

$$\sigma(b) = \frac{k_1^4}{16\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2} \frac{|S_b|^2}{(\omega_1 - \omega_{ba})^2 + (\Gamma_b/2)^2} \quad (10)$$

et une expression analogue pour $\sigma(c)$, et

$$\delta\sigma = \frac{k_1^4}{16\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2} \left\{ \frac{S_b S_c^*}{[\omega_1 - \omega_{ba} + i(\Gamma_b/2)][\omega_1 - \omega_{ca} - i(\Gamma_c/2)]} + c.c. \right\} \quad (11)$$

c) D'après la définition même de la section efficace différentielle, l'intensité lumineuse diffusée dans l'angle solide $\delta\Omega_2$ autour de κ_2 est :

$$I = \phi \delta\Omega_2 \int d\omega_1 \sigma(\kappa_1 \epsilon_1 \rightarrow \kappa_2 \epsilon_2) f(\omega_1) \quad (12)$$

a) En remplaçant σ par son expression (9), on obtient

$$I = I(b) + I(c) + \delta I \quad (13)$$

où $I(b)$, $I(c)$, δI ont des expressions analogues à (12), au remplacement près de σ par $\sigma(b)$, $\sigma(c)$ ou $\delta\sigma$.

L'expression (10) montre que $\sigma(b)$ n'est non nul qu'au voisinage de $\omega_1 = \omega_{ba}$ sur une largeur Γ_b . Lorsqu'on fait l'intégrale sur ω_1 , le fait que la largeur Δ de $f(\omega_1)$ soit grande devant Γ_b permet d'assimiler la lorentzienne à une fonction $\delta(\omega_1 - \omega_{ba})$:

$$I(b) = \frac{k_{ba}^4}{8\pi\hbar^2\varepsilon_0^2} \frac{|S_b|^2}{\Gamma_b} f(\omega_{ba}) \quad (14)$$

L'expression de $I(c)$ est analogue. Lorsqu'on balaie E_b de quelques $\hbar\Gamma_b$, $I(b)$ varie, en valeur relative, d'une quantité de l'ordre de Γ_b/Δ qui est très petite.

b) De même, $\delta\sigma$ n'est important qu'au voisinage de $\omega_1 \approx \omega_{ba} \approx \omega_{ca}$. On peut alors assimiler $f(\omega_1)$ à une constante $f(\omega_{ba})$. L'intégrale sur ω_1 de $\delta\sigma$ est effectuée par la

méthode des résidus et donne

$$\delta I = \frac{k_{ba}^4}{8\pi\hbar^2\epsilon_0^2} f(\omega_{ba}) \left\{ \frac{iS_b S_c^*}{\omega_{cb} + i\frac{\Gamma_b + \Gamma_c}{2}} + c.c. \right\} \quad (15)$$

δI varie de façon résonnante en $\omega_{cb} = 0$, avec une largeur de l'ordre de $(\Gamma_b + \Gamma_c)$. Lorsqu'on balaye x autour de x_0 , la forme de la résonance est lorentzienne, mélange d'absorption et de dispersion dépendant de la valeur du nombre complexe $S_b S_c^*$. Pour que δI soit non nul, il faut que

$$S_b S_c^* = (\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ab})(\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ab}^*)(\epsilon_2 \cdot \mathbf{d}_{ac}^*)(\epsilon_1 \cdot \mathbf{d}_{ac}) \quad (16)$$

soit non nul, ce qui implique que chacun des facteurs doit être différent de zéro. Physiquement, il faut donc que les polarisations ϵ_1 et ϵ_2 puissent exciter aussi bien l'état b que l'état c . Elles excitent et détectent respectivement des *superpositions linéaires* des états $|b\rangle$ et $|c\rangle$. Au point de croisement, la superposition créée par les photons incidents est stationnaire. Elle subsiste jusqu'à la réémission du photon $k_2 \epsilon_2$. Loin de ce point, la superposition d'états évolue avant la réémission du photon qui se fait à partir d'un état différent, de sorte que l'intensité lumineuse détectée est en général différente.

Le phénomène peut aussi être compris comme une interférence entre les *amplitudes de diffusion* permettant de passer du même état initial $|a; k_1 \epsilon_1\rangle$ au même état final $|a; k_2 \epsilon_2\rangle$ via deux « chemins » différents passant, soit par l'état $|b; 0\rangle$, soit par l'état $|c; 0\rangle$ (Fig. 2). L'intensité diffusée est maximum lorsque les deux amplitudes sont en phase. La différence de phase entre ces deux amplitudes dépend de l'écart d'énergie entre les deux états et varie rapidement pour les photons résonnantes en fonction de $E_b - E_c$, ce qui se traduit par une variation rapide de l'intensité diffusée sur un intervalle d'ordre de $\hbar(\Gamma_b + \Gamma_c)$ autour du point de croisement.

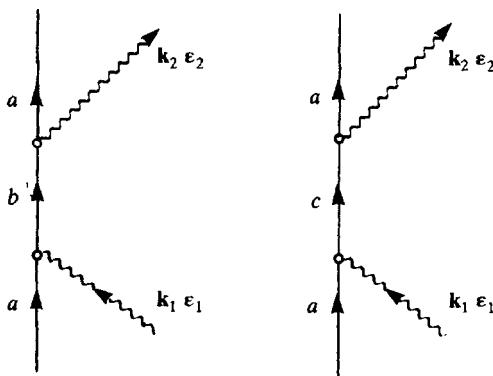


Figure 2. Amplitudes de diffusion dont l'interférence donne naissance à la résonance de croisement de niveaux.

7. DÉPLACEMENT RADIATIF D'UN NIVEAU ATOMIQUE. FORMULE DE BETHE POUR LE DÉPLACEMENT DE LAMB

Le but de cet exercice est de calculer l'expression du déplacement radiatif des niveaux de l'atome d'hydrogène, et de retrouver ainsi l'expression établie pour la première fois par Bethe (*) à propos du niveau $2s$ (déplacement de Lamb). Il est intéressant de mener parallèlement le même calcul dans les deux points de vue A.p et E.r, car, bien que conduisant au même résultat, les deux calculs se présentent de façon assez différente. Un troisième point de vue, celui de Pauli-Fierz, est étudié dans la dernière question. Il est particulièrement commode dans la mesure où la correction de masse de l'électron apparaît déjà explicitement dans l'hamiltonien.

Nous introduisons les simplifications suivantes :

- seuls les modes de vecteur d'onde inférieur à une borne k_M telle que $k_M a_0 \ll 1$ (a_0 étant le rayon de Bohr) sont pris en compte. L'approximation des grandes longueurs d'onde sera faite pour ces modes.
- l'électron est considéré comme une particule sans spin, de masse m , de charge q . Le proton est supposé infiniment lourd, fixé à l'origine, de sorte que l'énergie potentielle de l'électron au point \mathbf{r} est

$$V_0(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

Les opérateurs \mathbf{r} et \mathbf{p} étant les opérateurs quantiques habituels relatifs à l'électron, les hamiltoniens du système dans les points de vue A.p et E.r s'écrivent respectivement :

$$H = H_0 + H_I \quad (2)$$

et

$$H' = H_0 + \epsilon'_{\text{dip}} + H'_I \quad (3)$$

où

$$H_0 = H_A + H_R \quad (4)$$

avec

$$H_A = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + \epsilon_{\text{Coul}} \quad ; \quad \epsilon_{\text{Coul}} = \frac{q^2}{4\pi^2\epsilon_0} \int_0^{k_M} dk = \frac{q^2 k_M}{4\pi^2\epsilon_0} \quad (5)$$

$$H_R = \sum_j \hbar\omega_j (a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}) \quad (6)$$

(*) Voir H.A. Bethe, Phys. Rev. 72, 339 (1947) et Bethe and Salpeter (§ 19).

A l'approximation des grandes longueurs d'onde, les hamiltoniens d'interaction s'écrivent :

$$H_I = H_{I1} + H_{I2} = -\frac{q}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{0}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{0}) \quad (7)$$

$$H'_I = -q\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \quad (8)$$

L'énergie propre dipolaire vaut

$$\varepsilon'_{\text{dip}} = \frac{q^2}{2\epsilon_0 L^3} \sum_j (\mathbf{\epsilon}_j \cdot \mathbf{r})^2 \quad (9)$$

On rappelle l'expression des opérateurs $\mathbf{A}(\mathbf{0})$ et $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0})$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}) = \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_j L^3}} \mathbf{\epsilon}_j (a_j + a_j^\dagger) \quad (10)$$

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) = i \sum_j \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2\epsilon_0 L^3}} \mathbf{\epsilon}_j (a_j - a_j^\dagger) \quad (11)$$

Soit $|a;0\rangle$ l'état fondamental de H_A en présence du vide. Les corrections à l'énergie E_a de cet état, produites par le couplage de l'électron avec le champ transverse, s'écrivent respectivement dans les deux points de vue, et à l'ordre 2 en q :

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_a &= \langle a;0 | H_{I2} | a;0 \rangle + \\ &+ \sum_j \sum_b \frac{\langle a;0 | H_{I1} | b; \mathbf{k}_j \mathbf{\epsilon}_j \rangle \langle b; \mathbf{k}_j \mathbf{\epsilon}_j | H_{I1} | a;0 \rangle}{E_a - (E_b + \hbar\omega_j)} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \hbar\Delta'_a &= \langle a;0 | \varepsilon'_{\text{dip}} | a;0 \rangle + \\ &+ \sum_j \sum_b \frac{\langle a;0 | H'_I | b; \mathbf{k}_j \mathbf{\epsilon}_j \rangle \langle b; \mathbf{k}_j \mathbf{\epsilon}_j | H'_I | a;0 \rangle}{E_a - (E_b + \hbar\omega_j)} \end{aligned} \quad (13)$$

a) En utilisant les notations suivantes,

$$k_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar c \quad (14.a)$$

$$\mathbf{p}_{ab} = \langle a | \mathbf{p} | b \rangle \quad (14.b)$$

$$\mathbf{r}_{ab} = \langle a | \mathbf{r} | b \rangle \quad (14.c)$$

montrer que Δ_a et Δ'_a se mettent sous la forme

$$\hbar\Delta_a = \frac{r_0}{\pi} \int_0^{k_M} \hbar ck dk - \frac{2r_0}{3\pi m} \int_0^{k_M} k dk \sum_b \frac{|\mathbf{p}_{ab}|^2}{k_{ba} + k} \quad (15)$$

$$\hbar\Delta'_a = \frac{2r_0}{3\pi} mc^2 \sum_b |\mathbf{r}_{ab}|^2 \int_0^{k_M} k^2 dk - \frac{2r_0}{3\pi} mc^2 \int_0^{k_M} k^3 dk \sum_b \frac{|\mathbf{r}_{ab}|^2}{k_{ba} + k} \quad (16)$$

où r_0 est une constante que l'on calculera.

b) On supposera k_M grand devant toutes les quantités k_{ba} relatives aux états qui contribuent de façon appréciable aux sommes sur $|b\rangle$ des expressions (12) et (13). Développer $\hbar\Delta_a$ et $\hbar\Delta'_a$ en puissances de k_M sous la forme

$$\hbar\Delta_a = D_a + P_a + L_a \quad (17)$$

$$\hbar\Delta'_a = T'_a + D'_a + P'_a + L'_a \quad (18)$$

où T, D, P, L sont des expressions d'ordres respectifs k_M^3, k_M^2, k_M et $\log k_M$. Les termes d'ordre $1/k_M, (1/k_M)^2, \dots$ sont négligés. Calculer ces différents termes et montrer que T'_a est nul.

c) Etablir la relation

$$im ck_{ab} \mathbf{r}_{ab} = \mathbf{p}_{ab} \quad (19)$$

et démontrer que $D'_a = D_a$, $P'_a = P_a$ et $L'_a = L_a$. En introduisant la quantité

$$\delta m = \frac{4}{3} \frac{\epsilon_{Coul}}{c^2}, \quad (20)$$

interpréter physiquement le terme P_a .

d) La formule de Bethe est l'expression du dernier terme L_a de (17). En introduisant l'énergie d'excitation moyenne $\hbar c K_a$ par la formule

$$\left(\sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 k_{ba} \right) \log \frac{k_M}{K_a} = \sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 k_{ba} \log \frac{k_M}{k_{ba}} \quad (21)$$

et en utilisant le double commutateur de \mathbf{p} avec H_0 , montrer que L_a se met sous la forme

$$L_a = \frac{\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \log \frac{k_M}{K_a} \langle a | \frac{q^2}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}) | a \rangle \quad (22)$$

($\alpha = q^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ est la constante de structure fine).

e) Généraliser l'expression (17) aux niveaux d'énergie $|nlm\rangle$ de l'atome d'hydrogène autres que l'état fondamental. Montrer que, dans une multiplicité n , tous les niveaux ont le même déplacement $\hbar\Delta_{nl}$, sauf les états $s (l=0)$.

f) Dans le point de vue de Pauli-Fierz, l'hamiltonien s'écrit (voir formule (34') du complément B_{II})

$$H'' = \frac{p^2}{2m^*} + V_0(\mathbf{r} + \xi) + H_{I2} + \epsilon_{Coul} + H_R \quad (23)$$

où $m^* = m + \delta m$ et où ξ est donné par

$$\xi = \frac{q}{m} \mathbf{Z}(0) = \frac{q}{m} \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_j L^3}} \left[\frac{\epsilon_j}{i\omega_j} (a_j - a_j^+) \right] \quad (24)$$

α - Montrer qu'à l'ordre 2 vis à vis du couplage avec le champ transverse, le déplacement $\hbar\Delta''_a$ de l'état $|a;0\rangle$ s'écrit

$$\hbar\Delta''_a = D_a + L''_a \quad (25)$$

où

$$\begin{aligned} L''_a &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \langle 0 | \xi_\mu \xi_\nu | 0 \rangle \langle a | \nabla_\mu \nabla_\nu V_0(\mathbf{r}) | a \rangle + \\ &+ \sum_j \sum_{\mu\nu} \sum_b \langle 0 | \xi_\mu | \mathbf{k}_j \epsilon_j \rangle \langle \mathbf{k}_j \epsilon_j | \xi_\nu | 0 \rangle \frac{\langle a | \nabla_\mu V_0 | b \rangle \langle b | \nabla_\nu V_0 | a \rangle}{-\hbar c(k_{ba} + k_j)} \end{aligned} \quad (26)$$

μ et ν repérant les composantes x, y et z des vecteurs ξ et ∇ .

β - Démontrer les formules

$$\langle 0 | \xi_\mu \xi_\nu | 0 \rangle = \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \int_{k_m}^{k_M} \frac{dk}{k} = \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \left(\text{Log} \frac{k_M}{k_m} \right) \quad (27)$$

et

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\langle 0 | \xi_\mu | \mathbf{k}_j \epsilon_j \rangle \langle \mathbf{k}_j \epsilon_j | \xi_\nu | 0 \rangle}{\hbar c k_{ba} + \hbar c k_j} &= \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \int_{k_m}^{k_M} \frac{dk}{k} \frac{1}{\hbar c(k_{ba} + k)} \\ &\approx \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{\delta_{\mu\nu}}{\hbar c k_{ba}} \text{Log} \frac{k_{ba}}{k_m} \end{aligned} \quad (28)$$

où k_{ba} est positif, petit devant k_M et où k_m est une borne inférieure supposée très petite, mais non nulle.

γ - En utilisant les résultats précédents, montrer que L''_a se met sous la forme

$$\begin{aligned} L''_a &= \frac{\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left\{ \langle a | \Delta V_0(\mathbf{r}) | a \rangle \left(\text{Log} \frac{k_M}{k_m} \right) - \right. \\ &\quad \left. - 2 \sum_{b \neq a} \frac{\langle a | \nabla V_0 | b \rangle \cdot \langle b | \nabla V_0 | a \rangle}{\hbar c k_{ba}} \text{Log} \frac{k_{ba}}{k_m} \right\} \end{aligned} \quad (29)$$

Interpréter physiquement le premier terme et la correction apportée par le second.

A l'aide de la formule (21) et du commutateur de \mathbf{p} avec H_0 , montrer que L''_a est égal à L_a .

Solution

a) D'après (7) et (10)

$$\langle a;0 | H_{12} | a;0 \rangle = \frac{q^2}{2m} \sum_{ij} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \sqrt{\omega_i \omega_j}} \langle 0 | (a_i + a_i^\dagger)(a_j + a_j^\dagger) | 0 \rangle \quad (30)$$

Le dernier facteur vaut δ_{ij} et le remplacement de la somme discrète par une intégrale donne :

$$\langle a;0 | H_{12} | a;0 \rangle = \frac{q^2 \hbar}{4\epsilon_0 m} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_e \frac{1}{\omega} = \frac{r_0}{\pi} \int_0^{k_M} \hbar c k dk \quad (31)$$

où

$$r_0 = \frac{q^2}{4\pi \epsilon_0 m c^2} = \alpha \left(\frac{\hbar}{mc} \right) \quad (32)$$

est le rayon classique de l'électron (α est la constante de structure fine). L'élément de matrice de H_{11} vaut

$$\langle a;0 | H_{11} | b; \mathbf{k}_f \epsilon_f \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_f L^3}} \left(\frac{-q}{m} \right) \langle a | \epsilon_f \cdot \mathbf{p} | b \rangle \quad (33)$$

et le second terme de (12) s'écrit

$$\sum_b \sum_j \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_j L^3} \frac{q^2}{m^2} \frac{|\epsilon_j \cdot \mathbf{p}_{ab}|^2}{[-\hbar c(k_{ba} + k_j)]} \quad (34)$$

Notons que $\mathbf{p}_{aa} = \mathbf{0}$, de sorte que le terme $b = a$ ne contribue pas. La somme sur les polarisations transverses s'effectue à l'aide de la formule (54) du complément A_I. Le passage à une somme continue donne alors

$$\sum_b \frac{-q^2}{2\epsilon_0 m c^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{|\mathbf{p}_{ab}|^2 - |\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{p}_{ab}|^2}{k(k_{ba} + k)} = -\frac{2r_0}{3\pi m} \int_0^{k_M} k dk \sum_b \frac{|\mathbf{p}_{ab}|^2}{k_{ba} + k} \quad (35)$$

En reportant (31) et (35) dans (12), on obtient l'expression (15) de $\hbar \Delta_a$.

Le premier terme de l'expression (13) de $\hbar \Delta'_a$ s'écrit, d'après (9) :

$$\begin{aligned} \langle a;0 | \epsilon'_{\text{dip}} | a;0 \rangle &= \frac{q^2}{2\epsilon_0 L^3} \sum_j \langle a | (\epsilon_j \cdot \mathbf{r})^2 | a \rangle \\ &= \frac{q^2}{2\epsilon_0} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \langle a | \mathbf{r}^2 - (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r})^2 | a \rangle \\ &= \frac{2}{3\pi} mc^2 r_0 \langle a | \mathbf{r}^2 | a \rangle \int_0^{k_M} k^2 dk \\ &= \frac{2}{3\pi} mc^2 r_0 \left(\sum_b |\mathbf{r}_{ab}|^2 \right) \int_0^{k_M} k^2 dk \end{aligned} \quad (36)$$

Le calcul du deuxième terme de (13) est très semblable à celui du deuxième terme de (12) au remplacement près de $\epsilon_j \cdot \mathbf{p}$ par $i m \omega_j \epsilon_j \cdot \mathbf{r}$. En faisant cette substitution sur (35), on trouve directement le second terme de (16).

b) Considérons les fractions rationnelles en k figurant dans les deuxièmes termes de (15) et (16) et décomposons les en éléments simples :

$$k \frac{1}{k_{ba} + k} = 1 - k_{ba} \frac{1}{k_{ba} + k} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} k^3 \frac{1}{k_{ba} + k} &= [k^2(k_{ba} + k) - k_{ba}(k_{ba} + k)k + k^2 k_{ba}^2(k_{ba} + k) - k_{ba}^3] \frac{1}{k_{ba} + k} \\ &= k^2 - k_{ba}k + k_{ba}^2 - k_{ba}^3 \frac{1}{k_{ba} + k} \end{aligned} \quad (38)$$

Le premier terme de (38) donne par intégration une contribution en k_M^3 à $\hbar \Delta'_a$, qu'il faut regrouper avec le premier terme de (16). On constate qu'ils s'annulent de sorte que $T'_a = 0$. L'intégration des autres termes de (38) ou de (37), ainsi que celle du premier terme de (15) donne :

$$D_a = \frac{r_0}{2\pi} \hbar c k_M^2 \quad D'_a = \frac{r_0}{3\pi} mc^2 k_M^2 \left(\sum_b k_{ba} |\mathbf{r}_{ab}|^2 \right) \quad (39)$$

$$P_a = -\frac{2r_0}{3\pi m} k_M \left(\sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 \right) \quad P'_a = -\frac{2r_0}{3\pi} mc^2 k_M \left(\sum_b k_{ba}^2 |\mathbf{r}_{ba}|^2 \right) \quad (40)$$

$$\begin{aligned} L_a &= \frac{2r_0}{3\pi m} \sum_b k_{ba} |\mathbf{p}_{ab}|^2 \text{Log} \frac{k_{ba} + k_M}{k_{ba}} \\ L'_a &= \frac{2r_0}{3\pi} mc^2 \sum_b k_{ab}^3 |\mathbf{r}_{ab}|^2 \text{Log} \frac{k_{ba} + k_M}{k_{ba}} \end{aligned} \quad (41)$$

Dans la mesure où $k_M \gg k_{ba}$, on peut, dans les expressions (41), faire l'approximation

$$\text{Log} \frac{k_{ba} + k_M}{k_{ba}} \approx \text{Log} \frac{k_M}{k_{ba}} \quad (42)$$

c) Partons du commutateur

$$[H_0, \mathbf{r}] = [\mathbf{p}^2/2m, \mathbf{r}] = -i\hbar \mathbf{p}/m \quad (43)$$

En prenant l'élément de matrice de cette équation entre les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$, on obtient (19). Le remplacement, dans les expressions (41) et (40) de L'_a et P'_a , de $k_{ba}^2 |\mathbf{r}_{ba}|^2$ par $|\mathbf{p}_{ab}|^2/m^2c^2$ donne immédiatement les expressions correspondantes de L_a et P_a .

Pour D'_a , il faut noter que

$$\begin{aligned} \sum_b k_{ab} \mathbf{r}_{ab}^* \cdot \mathbf{r}_{ab} &= \sum_b \frac{1}{2imc} [-\mathbf{p}_{ab}^* \cdot \mathbf{r}_{ab} + \mathbf{r}_{ab}^* \cdot \mathbf{p}_{ab}] = \\ &= \frac{1}{2imc} \langle a | -\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} | a \rangle = \frac{-3\hbar}{2mc} \end{aligned} \quad (44)$$

En reportant (44) dans l'expression (39) de D'_a , on retrouve l'expression de D_a .

Revenons sur l'expression (40) de P_a . A l'aide de la relation de fermeture sur $|b\rangle$, on peut la mettre sous la forme

$$P_a = -\frac{\langle a | \mathbf{p}^2 | a \rangle}{2m} \frac{\delta m}{m} \quad (45)$$

où

$$\frac{\delta m}{m} = \frac{4r_0}{3\pi} k_M = \frac{4}{3} \frac{q^2}{4\pi^2 \epsilon_0} k_M \times \frac{1}{mc^2} = \frac{4}{3} \frac{e_{Coul}}{mc^2} \quad (46)$$

Le terme P_a s'interprète comme la variation de la moyenne dans l'état $|a\rangle$ du terme d'énergie cinétique $\mathbf{p}^2/2m$, due à une variation de masse δm . D'après (46), δm est (au facteur 4/3 près dû à la procédure de coupure non covariante) la contribution de l'énergie du champ coulombien de l'électron à sa masse, calculée en limitant l'intégrale sur k à k_M .

d) En faisant l'approximation (42) dans l'expression (41) de L_a , et en utilisant la formule (21), on obtient

$$L_a = \frac{2r_0}{3\pi m} \text{Log} \frac{k_M}{K_a} \sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 k_{ba} \quad (47)$$

Remarquons que

$$\begin{aligned} \langle a | [p_x, [p_x, H_0]] | a \rangle &= \sum_b \{ (p_x)_{ab} \langle b | [p_x, H_0] | a \rangle - \langle a | [p_x, H_0] | b \rangle (p_x)_{ba} \} \\ &= \sum_b \{ |(p_x)_{ab}|^2 (E_a - E_b) - (E_b - E_a) |(p_x)_{ab}|^2 \} \\ &= 2\hbar c \sum_b k_{ab} |(p_x)_{ab}|^2 \end{aligned} \quad (48)$$

Par ailleurs

$$[p_x, [p_x, H_0]] = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} V_0(r) \quad (49)$$

de sorte que

$$\sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 k_{ba} = \frac{\hbar}{2c} \langle a | \Delta V_0(r) | a \rangle = \frac{\hbar}{2c} \langle a | \frac{q^2}{\epsilon_0} \delta(r) | a \rangle \quad (50)$$

Finalement, en utilisant (50) et (32) dans (47), L_a se met dans la forme (22).

e) Les niveaux autres que l'état fondamental sont dégénérés et l'application de la théorie des perturbations nécessite quelques précautions. En fait, le champ de rayonnement est isotrope, et lorsqu'on somme sur tous les modes, il n'introduit pas de couplage au second ordre entre des niveaux de nombres quantiques (l, m) différents. Dans chacun des sous-espaces (l, m) , H_A a un spectre non dégénéré caractérisé par le nombre quantique n . On peut alors appliquer les mêmes calculs que précédemment.

Une deuxième différence apparaît du fait que les dénominateurs $k_{ba} + k$ peuvent maintenant s'annuler pour $k_{ba} < 0$, traduisant la possibilité pour l'atome dans des niveaux excités d'émettre réellement des photons. Si on s'intéresse aux positions des niveaux d'énergie, les expressions (12) et (13) restent valables, à condition de remplacer la fraction par sa partie principale. Lorsqu'on procède à l'intégration sur k , il vient :

$$\begin{aligned} \int_0^{k_M} dk \mathcal{P} \frac{1}{k_{ba} + k} &= \int_0^{|k_{ba}| - \eta} \frac{dk}{k - |k_{ba}|} + \int_{|k_{ba}| + \eta}^{k_M} \frac{dk}{k - |k_{ba}|} = \\ &= \text{Log} \frac{\eta}{|k_{ba}|} + \text{Log} \frac{k_M - |k_{ba}|}{\eta} = \text{Log} \frac{k_M}{|k_{ba}|} \end{aligned} \quad (51)$$

Le résultat est le même que pour k_{ba} positif, à condition de remplacer k_{ba} par $|k_{ba}|$ dans le logarithme. On obtient ainsi :

$$\hbar\Delta_{nlm} = \frac{r_0}{2\pi} \hbar ck_M^2 - \frac{\delta m}{m} \langle nlm | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | nlm \rangle + L_{nl} \quad (52)$$

avec

$$L_{nl} = \frac{\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \left(\text{Log} \frac{k_M}{K_{nl}} \right) \langle nlm | \frac{q^2}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}) | nlm \rangle \quad (53)$$

où K_{nl} est défini de façon analogue à K_s (voir formule (21)). Le premier terme de (52) est indépendant du niveau et le second, d'après le théorème du viriel, ne dépend que de n . L_{nl} est proportionnel à la moyenne de $\delta(\mathbf{r})$, donc à $|\varphi_{nlm}(0)|^2$, qui est non nul seulement pour les états s ($l=0$). Le déplacement des états s par rapport aux autres niveaux de la même multiplicité est positif. Son interprétation physique a été donnée dans le chapitre II (§ E-1-b).

f) Plaçons-nous dans le point de vue de Pauli-Fierz et considérons d'abord les termes d'ordre 0 vis-à-vis du couplage avec le champ transverse ($\xi = 0$, et donc $H_{I2} = 0$). Les valeurs propres de l'hamiltonien

$$H''_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V_0(\mathbf{r}) + H_R \quad (54)$$

ne sont pas identiques à celles de H_0 . En effet, la contribution de la masse électromagnétique δm de la particule à l'énergie cinétique a été déjà prise en compte par l'intermédiaire de m^* (la signification physique des états propres est aussi différente par suite de la transformation des observables ; voir complément B_{II}). Nous noterons E_a^* l'énergie de l'état fondamental $|a;0\rangle$ de H''_0 . Dans l'expression du déplacement $\hbar\Delta_a$ de ce niveau, nous ne retrouverons pas le terme P_a puisqu'il a été pris en compte dans E_a^* .

α - A l'ordre 2 vis à vis du couplage avec le champ transverse, l'hamiltonien H'' s'écrit

$$H'' = H''_0 + H''_1 \quad (55)$$

où

$$H''_1 = H''_{I1} + H''_{I2} + \dots \quad (56)$$

avec

$$H''_{I1} = (\xi \cdot \nabla) V_0(\mathbf{r}) \quad (57.a)$$

$$H''_{I2} = \frac{1}{2} (\xi \cdot \nabla)^2 V_0(\mathbf{r}) + H_{I2} \quad (57.b)$$

Le déplacement $\hbar\Delta_a$ vaut donc, à l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_a'' &= \langle a;0 | H''_{I2} | a;0 \rangle + \\ &+ \sum_j \sum_b \frac{\langle a;0 | H''_{I1} | b; \mathbf{k}_j \epsilon_j \rangle \langle b; \mathbf{k}_j \epsilon_j | H''_{I1} | a;0 \rangle}{E_a^* - (E_b^* + \hbar c k_j)} , \end{aligned} \quad (58)$$

soit encore, après utilisation de (31), (57) et avec l'approximation $E_a^* - E_b^* \approx -\hbar c k_{ba}$:

$$\hbar\Delta_a'' = D_a + L_a'', \quad (59)$$

L_a'' étant donné par (26).

β - D'après (24)

$$\langle 0 | \xi_\mu | \mathbf{k}_j \epsilon_j \rangle = \frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_j L^3}} \frac{(\epsilon_j)_\mu}{i \omega_j} \quad (60)$$

En utilisant cet élément de matrice et la formule (54) du complément A_I , on trouve

$$\begin{aligned} \langle 0 | \xi_\mu \xi_\nu | 0 \rangle &= \sum_j \langle 0 | \xi_\mu | k_j \epsilon_j \rangle \langle k_j \epsilon_j | \xi_\nu | 0 \rangle = \\ &= \frac{q^2 \hbar}{2 \varepsilon_0 m^2} \sum_j \frac{(\epsilon_j)_\mu (\epsilon_j)_\nu}{\omega_j^3 L^3} = \frac{q^2}{4 \pi \varepsilon_0 \hbar c} \left(\frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \right) (2\pi) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^3} \sum_i \epsilon_\mu \epsilon_\nu = \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^2} \frac{1}{k^3} \delta_{\mu\nu} = \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \int_{k_m}^{k_M} \frac{dk}{k} \end{aligned} \quad (61)$$

D'où la formule (27).

Pour (28), le calcul est très semblable et on arrive à :

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\langle 0 | \xi_\mu | k_j \epsilon_j \rangle \langle k_j \epsilon_j | \xi_\nu | 0 \rangle}{\hbar c k_{ba} + \hbar c k_j} &= \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^2} \frac{1}{k^3} \delta_{\mu\nu} \frac{1}{\hbar c (k_{ba} + k)} \\ &= \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \int_{k_m}^{k_M} \frac{dk}{k} \frac{1}{\hbar c (k_{ba} + k)} \\ &= \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta_{\mu\nu} \frac{1}{\hbar c k_{ba}} \int_{k_m}^{k_M} dk \left[\frac{1}{k} - \frac{1}{k_{ba} + k} \right] \end{aligned} \quad (62)$$

L'intégrale vaut $\text{Log} \left(\frac{k_M k_{ba} + k_m}{k_m k_{ba} + k_M} \right) \approx \text{Log} \left(\frac{k_M k_{ba}}{k_m k_M} \right) = \text{Log} \frac{k_{ba}}{k_m}$. D'où la formule (28).

γ - En reportant (27) et (28) dans (26), on obtient immédiatement (29) (le terme $b = a$ est nul dans (26) car $\langle a | \nabla V_0 | a \rangle = 0$ et peut donc être exclu de la somme). Comme il est expliqué dans le complément B_{II} (§-3-b), le premier terme représente le résultat du moyennage du potentiel $V_0(\mathbf{r})$ par la particule lorsqu'elle effectue des mouvements d'oscillation d'amplitude ξ sous l'effet des fluctuations du vide. Toutefois ξ ne représente vraiment le déplacement de la particule que pour une particule libre. C'est encore une bonne approximation pour les modes de fréquence ck_j grandes devant les fréquences propres ck_{ba} de la particule dans le potentiel $V_0(\mathbf{r})$. Pour les modes basse fréquence, la réponse de la particule est affaiblie par la présence du potentiel. C'est ce qu'exprime le deuxième terme de (29).

En prenant l'élément de matrice de $[\mathbf{p}, H_0] = (\hbar/i) \nabla V_0(\mathbf{r})$ entre $|a\rangle$ et $|b\rangle$, on obtient

$$\mathbf{p}_{ab} \hbar c k_{ba} = (\hbar/i) \langle a | \nabla V_0 | b \rangle \quad (63)$$

Cette formule permet d'écrire le deuxième terme du crochet de (29) sous la forme

$$- 2 \sum_{b \neq a} |\mathbf{p}_{ab} \hbar c k_{ba}|^2 \frac{1}{\hbar c k_{ba}} \text{Log} \frac{k_{ba}}{k_m} = - \frac{2c}{\hbar} \sum_b |\mathbf{p}_{ab}|^2 k_{ba} \text{Log} \frac{k_{ba}}{k_m} \quad (64)$$

A l'aide de (21) (k_M étant changé en k_m) et de (50), il se met encore sous la forme

$$- \langle a | \Delta V_0(\mathbf{r}) | a \rangle \text{Log} \frac{K_a}{k_m} \quad (65)$$

et se regroupe avec le premier terme du crochet de (29) pour donner $\text{Log}(k_M/K_a)$. Le remplacement de $\Delta V_0(\mathbf{r})$ par $(q^2/\varepsilon_0) \delta(\mathbf{r})$ conduit alors à une expression de L''_a identique à celle (22) de L_A .

8. RAYONNEMENT DE FREINAGE. CORRECTIONS RADIATIVES À LA DIFFUSION ÉLASTIQUE PAR UN POTENTIEL

Le but de cet exercice et de l'exercice suivant est d'étudier un certain nombre de processus radiatifs qui apparaissent lors de la diffusion d'une particule chargée par un potentiel. La partie A est consacrée à l'étude de la section efficace d'émission d'un photon par une particule freinée par un potentiel (rayonnement de freinage ou « Bremsstrahlung »). La partie B examine les premières corrections radiatives à la section efficace de diffusion élastique (diffusion sans émission de photons). Enfin, l'exercice suivant montre comment les divergences à basse fréquence des sections efficaces calculées en A et B peuvent être éliminées par une redéfinition appropriée des grandeurs mesurées, qui tient compte de la résolution finie en énergie du détecteur observant la particule diffusée.

Le point de vue de Pauli-Fierz est particulièrement commode pour aborder ces divers problèmes. Il sera adopté tout au long de ces deux exercices. Le lecteur pourra se reporter utilement au complément B_{II} qui présente en détail ce point de vue, de même qu'au complément A_I qui regroupe les résultats essentiels concernant le calcul perturbatif des amplitudes et sections efficaces de diffusion.

Notations

Dans le point de vue de Pauli-Fierz, l'hamiltonien H d'une particule chargée, couplée à un potentiel extérieur statique et au rayonnement transverse, s'écrit :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_e(\mathbf{r} + \xi) + H_R \quad (1)$$

Dans (1), q est la charge de la particule, m sa masse (corrigée de l'inertie électromagnétique), \mathbf{r} sa position (supposée proche de l'origine 0), \mathbf{p} son impulsion ; $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ est l'énergie potentielle de la particule dans le potentiel extérieur, évaluée au point $\mathbf{r} + \xi$ où

$$\xi = \frac{q}{m} \mathbf{Z}(0), \quad (2)$$

$\mathbf{Z}(\mathbf{r})$ étant un opérateur de champ (« vecteur de Hertz ») défini par :

$$\mathbf{Z}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega L^3}} \left[\epsilon \frac{a_{\mathbf{k}\epsilon}}{i\omega} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \epsilon \frac{a_{\mathbf{k}\epsilon}^+}{i\omega} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (3)$$

Enfin, H_R est l'hamiltonien du rayonnement dont le développement en a et a^+ est donné par la formule (45) de l'appendice.

Par rapport à l'expression (34') du complément B_{II} , nous avons ignoré dans (1) l'énergie propre de Coulomb ϵ_{Coul} de la particule (qui est une constante) et un terme de rayonnement en $q^2 A_\perp^2(\mathbf{0})/2m$ dont on peut montrer qu'il joue un rôle négligeable dans les problèmes de diffusion par le potentiel V_e étudiés dans cet exercice et le suivant.

A. Rayonnement de freinage

Dans cette première partie, l'état initial du système particule + champ est l'état

$$|\psi_{in}\rangle = |\mathbf{p}_1; 0\rangle \quad (4.a)$$

représentant la particule d'impulsion \mathbf{p}_1 en présence du vide de photons. L'état final est l'état

$$|\psi_{fin}\rangle = |\mathbf{p}_2, \mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (4.b)$$

représentant la particule d'impulsion \mathbf{p}_2 en présence d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$, d'énergie $\hbar\omega$. On note $E_1 = \mathbf{p}_1^2/2m$, $E_2 = \mathbf{p}_2^2/2m$. Les états $|\mathbf{p}_i\rangle$ seront discrétilisés, comme les modes du champ, dans un cube de côté L .

a) Montrer qu'à la limite non relativiste ($p_1/m \ll c$), l'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ du photon émis est très petite devant \mathbf{p}_1 . Dans toute la suite, on négligera l'impulsion des photons émis et on notera

$$\hbar\mathbf{Q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \quad (5)$$

la variation d'impulsion de la particule au cours de la collision.

b) Montrer que l'hamiltonien d'interaction permettant de passer de $|\psi_{in}\rangle$ à $|\psi_{fin}\rangle$ ne peut provenir que du terme $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ de H . Calculer, à l'ordre 1 en V_e et 1 en q , l'amplitude $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$ pour que la particule soit diffusée de \mathbf{p}_1 à \mathbf{p}_2 avec émission d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ (élément de la matrice S entre $\langle\psi_{fin}|$ et $|\psi_{in}\rangle$). On exprimera le résultat obtenu en fonction de

$$\mathcal{V}_e(\mathbf{Q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} V_e(\mathbf{r}) \quad (6)$$

c) Sans entrer dans le détail des calculs, indiquer comment le calcul de $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$, à l'ordre 1 en V_e et 1 en q , se présente dans le point de vue de Coulomb. On pourra par exemple se contenter de discuter la forme que prennent, dans le point de vue de Coulomb, les états asymptotiques des processus de diffusion et donner les diagrammes qui contribuent à $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$ dans ce point de vue. Pourquoi le point de vue de Pauli-Fierz est-il plus simple ?

d) On fixe \mathbf{p}_1 et la direction $\mathbf{n}_2 = \mathbf{p}_2/p_2$ de la particule diffusée. Calculer, à partir des résultats de b), la probabilité par unité de temps $dw(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$ pour que la particule soit diffusée dans un angle solide $d\Omega_2$ autour de \mathbf{n}_2 , avec émission d'un photon de fréquence comprise entre ω et $\omega + d\omega$, dans l'angle solide $d\Omega$ autour de $\mathbf{k} = \mathbf{k}/k$. En déduire la valeur de la section efficace différentielle $d\sigma(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)/d\Omega_2 d\Omega d\omega$.

On suppose que la particule est un noyau de charge $q = Zq_p$ (où q_p est la charge du proton) et que le potentiel diffuseur est celui créé par un noyau de charge $Z'q_p$ fixe à l'origine. Exprimer la section efficace différentielle précédente en fonction de $Z, Z', \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega$ et de la constante de structure fine α .

e) Cette question examine la forme asymptotique de l'amplitude $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$ calculée en b) quand l'énergie $\hbar\omega$ du photon émis est très faible devant E_1 et E_2 et peut donc être négligée. Montrer que $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon)$ peut alors s'écrire

$$\mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}\epsilon) = \mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) \times q \eta_1(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon) \quad (7)$$

où $\mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)$ est l'amplitude de diffusion élastique (sans émission de photons), calculée à l'ordre 1 en V_e et 0 en q , et où $\eta_1(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon)$ est un coefficient correctif ne dépendant que de \mathbf{Q} et du photon $\mathbf{k}\epsilon$ émis. Donner l'expression de η_1 .

B. Corrections radiatives à la diffusion élastique

L'état initial est toujours (4.a). Par contre, l'état final est maintenant

$$|\psi_{fin}\rangle = |\mathbf{p}_2; 0\rangle \quad (8)$$

En l'absence de couplage avec le champ transverse, c'est-à-dire à l'ordre 0 en q , l'amplitude de diffusion à l'ordre 1 en V_e est notée $\mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)$ et a déjà été introduite en e). Le but de cette partie B est de calculer les premières corrections (en q^2), à cette amplitude.

f) Montrer qu'il faut développer $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ jusqu'à l'ordre 2 en ξ pour obtenir la première correction radiative à $\mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)$. Calculer cette correction et montrer, en utilisant les propriétés de la transformée de Fourier, qu'elle est proportionnelle à $\mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)$. En déduire que l'amplitude de diffusion élastique $\mathcal{A}_{el}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)$, à l'ordre 1 en V_e et à l'ordre 2 inclus en q , peut s'écrire

$$\mathcal{A}_{el}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) = \mathcal{A}_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) \mathcal{F}(\mathbf{Q}) \quad (9)$$

où le facteur de forme $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$ s'écrit

$$\mathcal{F}(\mathbf{Q}) = 1 - \frac{q^2}{2} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \eta_1^2(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon), \quad (10)$$

η_1 étant le coefficient introduit en (7). Quel est l'effet physique de $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$?

g) Montrer, après avoir remplacé la somme discrète par une intégrale, que la somme sur $\mathbf{k}\epsilon$ qui figure dans le terme correctif de (9) diverge logarithmiquement en $\log k_m$ où k_m est la borne inférieure de l'intégrale sur $k = |\mathbf{k}|$. On gardera donc k_m fini et non nul, avant d'étudier dans l'exercice suivant comment cette « divergence infrarouge » peut être éliminée.

h) Sans entrer dans le détail des calculs, indiquer les diagrammes qu'il faudrait considérer pour étudier le même phénomène physique dans le point de vue de Coulomb.

i) Soit $d\sigma_{el}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)/d\Omega_2$ la section efficace différentielle de diffusion élastique à l'ordre 2 inclus en q . Montrer que

$$d\sigma_{el}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)/d\Omega_2 = \left[1 - q^2 \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \eta_1^2(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon) \right] d\sigma_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)/d\Omega_2 \quad (11)$$

où $d\sigma_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2)/d\Omega_2$ est la section efficace différentielle élastique d'ordre 0 en q .

j) On considère un ensemble \mathcal{E} de modes très basse fréquence. Montrer, en utilisant (7), (9) et (10) que la diminution de la section efficace de diffusion élastique due à l'émission et à la réabsorption d'un photon dans l'un des modes de l'ensemble \mathcal{E} est égale en valeur absolue à la section efficace d'émission d'un photon dans l'un quelconque des modes de l'ensemble \mathcal{E} . Que peut-on en déduire sur les sections efficaces de diffusion de la particule avec émission de 0 ou 1 photon ?

Solution

a) La conservation de l'énergie globale entraîne que

$$E_1 = E_2 + \hbar\omega \quad (12)$$

Comme E_2 est positif, il découle de (12) que

$$\hbar|\mathbf{k}| \leq \frac{E_1}{c} = |\mathbf{p}_1| \frac{|\mathbf{p}_1|}{2mc} = |\mathbf{p}_1| \frac{v_1}{2c} \ll |\mathbf{p}_1| \quad (13)$$

L'impulsion du photon émis est donc très petite en module devant celle de la particule.

b) Développons $V_\epsilon(\mathbf{r} + \xi)$ en puissances de $\xi = q Z(0)/m$

$$V_\epsilon(\mathbf{r} + \xi) = V_\epsilon(\mathbf{r}) + \xi \cdot \nabla V_\epsilon(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \xi_i \xi_j \partial^2 V_\epsilon / \partial r_i \partial r_j + \dots \quad (14)$$

Le terme d'ordre 1 en ξ relie $|\psi_{in}\rangle$ à $|\psi_{fin}\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{fin} | \xi \cdot \nabla V_\epsilon(\mathbf{r}) | \psi_{in} \rangle &= \frac{q}{m} \langle \mathbf{k}e | Z(0) | 0 \rangle \cdot \langle \mathbf{p}_2 | \nabla V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1 \rangle = \\ &= \frac{\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})}{L^3} \frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega^3 L^3}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (15)$$

Nous avons utilisé (3) et (5) et le fait que, si $\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})$ est la transformée de Fourier de $V_\epsilon(\mathbf{r})$ définie en (6), la transformée de Fourier de $\nabla V_\epsilon(\mathbf{r})$ apparaissant dans $L^3 \langle \mathbf{p}_2 | \nabla V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1 \rangle$ est égale à $-i \mathbf{Q} \mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})$.

En utilisant la formule (19) du complément A_I , on obtient alors, à l'ordre 1 en q et 1 en V_ϵ :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}e) &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{k}e | \xi \cdot \nabla V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1 \rangle \\ &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \frac{\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})}{L^3} \frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega^3 L^3}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (16)$$

où $\delta^{(T)}$ est une fonction delta de largeur de l'ordre de \hbar/T , T étant le temps d'interaction (formule (20) du complément A_I).

c) Notons tout d'abord que les états (4.a) et (4.b) sont bien des états asymptotiques corrects dans le point de vue de Pauli-Fierz. En effet, en dehors de la zone d'action du potentiel, le terme $V_\epsilon(\mathbf{r} + \xi)$ de (1) peut être négligé et l'hamiltonien H se réduit alors à l'hamiltonien $(\mathbf{p}^2/2m) + H_R$ dont les états (4.a) et (4.b) sont bien des états propres. Les états asymptotiques correspondant à (4.a) et (4.b) dans le point de vue de Coulomb s'obtiennent en faisant agir sur (4.a) et (4.b) l'opérateur unitaire

$$T^+ = \exp \left[-\frac{i}{\hbar m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{Z}(0) \right] \quad (17)$$

et ont une forme plus compliquée que (4.a) et (4.b), car ils représentent la particule incidente ou diffusée « habillée » par un nuage de photons virtuels qu'elle émet et réabsorbe.

Dans le calcul de l'amplitude d'émission d'un photon réel par la particule, on peut, à l'ordre le plus bas en q , remplacer T^+ par 1 et utiliser (4.a) et (4.b) pour décrire les états initial et final du processus de diffusion dans le point de vue de Coulomb. Il faut cependant, dans ce point de vue, deux interactions, l'une avec $V_\epsilon(\mathbf{r})$, l'autre avec $H_{II} = -q\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}_\perp(0)/m$ pour passer de $|\psi_{in}\rangle$ à $|\psi_{fin}\rangle$. Comme ces deux interactions peuvent se produire avec deux ordres temporels différents, il y a deux diagrammes (Figure 1). Le calcul de \mathcal{A} est alors plus complexe car c'est un calcul du second ordre avec un état intermédiaire (voir formule (28) du complément A_I).

d) Pour obtenir la probabilité de transition par unité de temps à partir de l'amplitude (16), il faut suivre la démarche du paragraphe 3 du complément A_I : éléver au carré le module de (16), utiliser le fait que le carré de $\delta^{(T)}$ est proportionnel à T (voir formule (49) de

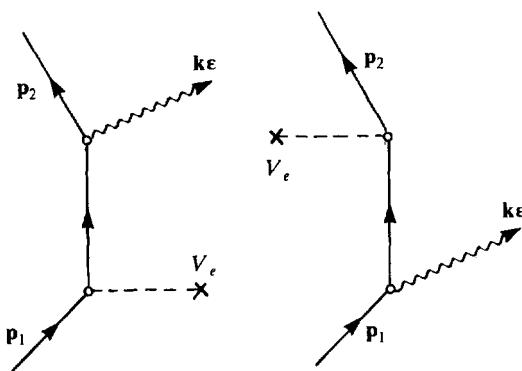


Figure 1. Diagrammes représentant l'émission de rayonnement de freinage dans le point de vue de Coulomb.

A_1), ce qui permet, après division par T , d'obtenir la probabilité de transition par unité de temps

$$\begin{aligned} w(p_1 \rightarrow p_2 + k\epsilon) &= |\mathcal{A}(p_1 \rightarrow p_2 + k\epsilon)|^2 / T = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \delta^{(T)}(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \frac{|\mathcal{V}_e(Q)|^2 q^2}{L^6} \frac{\hbar}{m^2 2\epsilon_0 \omega^3 L^3} (\epsilon \cdot Q)^2 \end{aligned} \quad (18)$$

Il faut ensuite sommer (18) sur les états finals de la particule et du photon. Les formules (42) et (46) de A_1 donnent, pour le nombre d'états de la particule dans $dE_2 d\Omega_2$, le résultat $L^3 m p_2 dE_2 d\Omega_2 / (2\pi\hbar)^3$ et pour le nombre d'états du photon dans $d\omega d\Omega$ le résultat $L^3 \omega^2 d\omega d\Omega / (2\pi c)^3$. L'intégrale sur E_2 fait disparaître la fonction $\delta^{(T)}$ de (18), à condition de remplacer E_2 par $E_1 - \hbar\omega$ et il vient finalement

$$dw(p_1 \rightarrow p_2 + k\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^5 2\epsilon_0 \hbar^3 c^3 L^3 m} \frac{q^2}{m} (\epsilon \cdot Q)^2 |\mathcal{V}_e(Q)|^2 p_2 \frac{d\omega}{\omega} d\Omega d\Omega_2 \quad (19)$$

Le flux associé à la particule incidente est $\phi = L^{-3} p_1 / m$, ce qui donne la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega d\Omega_2} = \frac{1}{\phi} \frac{dw(p_1 \rightarrow p_2 + k\epsilon)}{d\omega d\Omega d\Omega_2} = \frac{1}{(2\pi)^5 2\epsilon_0 \hbar^3 c^3} q^2 (\epsilon \cdot Q)^2 |\mathcal{V}_e(Q)|^2 \frac{p_2}{p_1} \frac{1}{\omega} \quad (20)$$

Si $q = Zq_p$ et si $V_e(r) = ZZ'q_p^2/4\pi\epsilon_0 r$, on a d'après (6) $\mathcal{V}_e(Q) = ZZ'q_p^2/\epsilon_0 Q^2$, ce qui donne pour (20)

$$\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega d\Omega_2} = Z^4 Z'^2 \frac{\alpha^3}{\pi^2} \frac{(\epsilon \cdot Q)^2}{Q^4} \frac{p_2}{p_1} \frac{1}{\omega} \quad (21)$$

où $\alpha = q_p^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 1/137$.

La présence de ω aux dénominateurs de (20) et (21) montre que $d\sigma/d\omega d\Omega d\Omega_2$ diverge quand $\omega \rightarrow 0$.

e) A l'ordre 1 en V_ϵ et 0 en q , il ne faut garder que le premier terme de (14), ce qui donne

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_\epsilon^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2) \langle \mathbf{p}_2; 0 | V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1; 0 \rangle \\ &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2) \mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q}) / L^3\end{aligned}\quad (22)$$

Si $\hbar\omega \ll E_1, E_2$, on peut négliger $\hbar\omega$ devant $E_1 - E_2$ dans la fonction $\delta^{(T)}$ de (16) (dans la suite des calculs, cette fonction $\delta^{(T)}$ agit en effet sur des fonctions lentement variables de l'énergie). Par ailleurs, si $\hbar\omega \ll E_1, E_2$, on peut, compte tenu de (12), négliger dans (16) la différence entre $|\mathbf{p}_1|$ et $|\mathbf{p}_2|$, de sorte que pour \mathbf{p}_1 et $\mathbf{n}_2 = \mathbf{p}_2/p_2$ fixés, les vecteurs d'onde \mathbf{Q} apparaissant dans (16) et (22) peuvent être considérés comme identiques (rappelons que dans (22), $|\mathbf{p}_1|$ et $|\mathbf{p}_2|$ sont rigoureusement égaux puisque $E_1 = E_2$). Moyennant ces approximations, la comparaison de (16) et (22) entraîne alors l'égalité (7) avec

$$\eta_1(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon) = \frac{1}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega^3 L^3}} \epsilon \cdot \mathbf{Q} \quad (23)$$

f) Le terme en $\xi \cdot \nabla V_\epsilon$ de (14) ne relie $|\mathbf{p}_1; 0\rangle$ à $|\mathbf{p}_2; 0\rangle$ qu'au deuxième ordre et ne contribue donc à l'amplitude de diffusion élastique qu'à l'ordre 2 en V_ϵ . Par contre, le terme suivant, en $\xi_i \xi_j$, relie directement $|\mathbf{p}_1; 0\rangle$ à $|\mathbf{p}_2; 0\rangle$ (l'un des deux opérateurs ξ_i créant un photon que l'autre détruit), de sorte que ce terme donne la première correction à (22), d'ordre 1 en V_ϵ et d'ordre 2 en q .

Compte tenu de (2) et (3), l'élément de matrice du dernier terme de (14) entre $|\mathbf{p}_1; 0\rangle$ et $\langle \mathbf{p}_2; 0 |$ vaut

$$\frac{1}{2} \frac{q^2}{m^2} \sum_{i,j=x,y,z} \langle 0 | Z_i(\mathbf{0}) Z_j(\mathbf{0}) | 0 \rangle \langle \mathbf{p}_2 | \nabla_i \nabla_j V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1 \rangle \quad (24)$$

D'après (3), le premier élément de matrice de (24) vaut

$$\langle 0 | Z_i(\mathbf{0}) Z_j(\mathbf{0}) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega^3 L^3} \epsilon_i \epsilon_j \quad (25)$$

Quant au second, les propriétés de la transformation de Fourier entraînent que

$$\langle \mathbf{p}_2 | \nabla_i \nabla_j V_\epsilon(\mathbf{r}) | \mathbf{p}_1 \rangle = -Q_i Q_j \frac{\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})}{L^3} \quad (26)$$

Finalement, la première correction radiative à (22) s'écrit

$$-2\pi i \delta^{(T)}(E_f - E_i) \frac{\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})}{L^3} \times \left[-\frac{q^2}{2m^2} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega^3 L^3} (\epsilon \cdot \mathbf{Q})^2 \right] \quad (27)$$

Le regroupement de (22) et (27) redonne bien (9) à condition de poser

$$\mathcal{F}(\mathbf{Q}) = 1 - \frac{q^2}{2m^2} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega^3 L^3} (\epsilon \cdot \mathbf{Q})^2 \quad (28)$$

ce qui démontre, compte tenu de (23), l'égalité (10).

Les corrections radiatives reviennent finalement à remplacer $\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})$ par $\mathcal{V}_\epsilon(\mathbf{Q})\mathcal{F}(\mathbf{Q})$. Tout se passe donc comme si l'on remplaçait le potentiel diffuseur $V_\epsilon(\mathbf{r})$ par le produit de convolution de $V_\epsilon(\mathbf{r})$ par la transformée de Fourier $F(\mathbf{r})$ de $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$. Ce résultat traduit le fait que la particule, vibrante sous l'effet des fluctuations du vide, moyenne le potentiel $V_\epsilon(\mathbf{r})$ sur l'étendue de son mouvement de vibration.

g) Le remplacement de $\sum_{k\epsilon}$ par $(L/2\pi)^3 \int k^2 dk d\Omega \sum_{\epsilon}$ dans le terme correctif de (9) fait apparaître l'intégrale $\int d\omega/\omega$ qui diverge logarithmiquement en $\log k_m$ quand la borne inférieure tend vers zéro.

h) Dans le point de vue de Coulomb, les corrections radiatives précédentes n'apparaissent qu'au troisième ordre et nécessitent de faire intervenir V_e une fois et H_{11} deux fois, d'où les trois diagrammes de la figure 2. Un tel calcul du troisième ordre est beaucoup plus complexe que celui du premier ordre fait ici et utilisant le dernier terme de (14). De plus, il n'est plus possible, dans le calcul d'ordre 2 en q fait ici, de remplacer T^+ par 1 dans (17) et d'utiliser (4.a) et (8) comme états final et initial de la diffusion dans le point de vue de Coulomb (ce qui fait apparaître des corrections de normalisation des états initial et final).

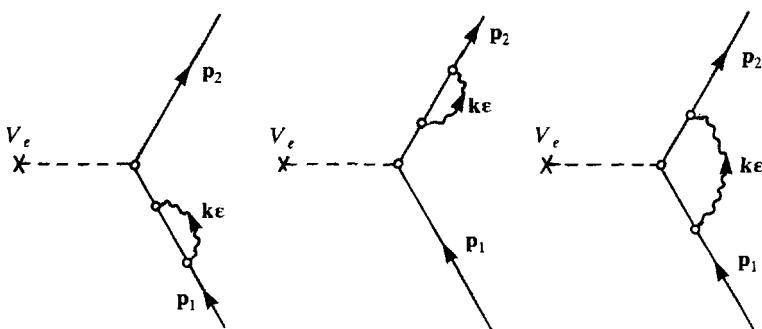


Figure 2. Diagrammes représentant, dans le point de vue de Coulomb, les premières corrections radiatives à la diffusion élastique par un potentiel.

i) Les calculs de $d\sigma_{el}$ et $d\sigma_{el}^{(0)}$ effectués à partir de \mathcal{A}_{el} et $\mathcal{A}_{el}^{(0)}$ font intervenir les mêmes fonctions $[\delta^{(7)}]^2$, les mêmes sommations sur les états finals et les mêmes flux incidents. Comme, d'après (9), \mathcal{A}_{el} et $\mathcal{A}_{el}^{(0)}$ sont proportionnels, on en déduit que le rapport $d\sigma_{el}/d\sigma_{el}^{(0)}$ n'est autre que le carré du crochet de (9) qui, à l'ordre 2 en q , coïncide bien avec le crochet de (11).

j) La diminution de la section efficace de diffusion élastique due à l'émission et à la réabsorption virtuelle d'un photon dans l'un quelconque des modes de l'ensemble \mathcal{E} est, d'après (11), égale à

$$\left[-q^2 \sum_{k\epsilon \in \mathcal{E}} \eta_i^2(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon) \right] d\sigma_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) / d\Omega_2 \quad (29)$$

Par ailleurs, d'après (7), la section efficace d'émission d'un photon dans l'un quelconque des modes de \mathcal{E} s'écrit

$$\left[q^2 \sum_{k\epsilon \in \mathcal{E}} \eta_i^2(\mathbf{Q}, \mathbf{k}\epsilon) \right] d\sigma_{el}^{(0)}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) / d\Omega_2 \quad (30)$$

La somme de (29) et (30) s'annule bien.

Réexaminons, à la lumière du résultat précédent, le problème des divergences infrarouges rencontrées plus haut, dans les questions *d)* et *g)*. Pour cela, concentrons nous sur les modes basse fréquence et supposons que la particule n'interagisse qu'avec les modes de l'ensemble \mathcal{E} . La compensation entre (29) et (30) montre que la somme des sections efficaces de diffusion avec émission de 0 ou 1 photon ne dépend pas des modes de \mathcal{E} et ne présente donc pas de divergence infrarouge quand l'ensemble \mathcal{E} est agrandi de manière à contenir des modes de fréquence de plus en plus basse.

Le résultat précédent permet alors de montrer que les grandeurs significatives expérimentalement ne présentent pas de divergence infrarouge. En effet, le détecteur observant la particule diffusée a toujours une résolution finie en énergie. Si l'énergie $\hbar\omega$ du photon émis est inférieure à la sensibilité en énergie $\hbar\delta$ du détecteur, l'observation effectuée sur la particule diffusée ne permettra pas de savoir si un photon très mou (de fréquence inférieure à δ) a été émis ou non au cours de la diffusion. La grandeur mesurée est donc bien la somme de la section efficace de diffusion élastique et de la section efficace de diffusion inélastique avec émission d'un photon de fréquence inférieure à δ . Cette somme reste finie alors que chaque section efficace présente séparément une divergence infrarouge.

Il convient toutefois de noter que les expressions (29) et (30) ont été obtenues ici de manière perturbative et peuvent donc n'avoir plus de sens dans certaines limites. Par exemple, quand la fréquence des modes de \mathcal{E} tend vers zéro, le crochet de (29) peut devenir supérieur à 1 en valeur absolue, à cause de la divergence infrarouge. Un tel résultat est évidemment absurde (il conduit à une section efficace de diffusion élastique négative !). Il montre la nécessité de tenir compte alors des termes d'ordre supérieur en q . C'est pourquoi une discussion satisfaisante de la « catastrophe infrarouge » ne peut être donnée que dans le cadre d'un traitement non perturbatif en q (voir exercice suivant).

9. RAYONNEMENT DE FREINAGE DE BASSE FRÉQUENCE. ÉTUDE NON PERTURBATIVE DE LA « CATASTROPHE INFRAROUGE »

Le but de cet exercice est d'étudier le rayonnement émis à basse fréquence par une particule chargée lors de la diffusion de cette particule par un potentiel statique V_e .

Le problème est tout d'abord analysé dans le cadre de la théorie classique du rayonnement (partie A). On étudie ensuite, dans une deuxième partie B, les amplitudes décrivant la diffusion de la particule avec émission d'un nombre arbitraire de photons basse fréquence. Le calcul est effectué de manière non perturbative vis à vis du couplage entre particule chargée et champ transverse, dans le point de vue de Pauli-Fierz. Il est possible alors d'établir un lien entre les descriptions classique et quantique du champ rayonné et de montrer comment les divergences « infrarouges » apparaissant dans le calcul perturbatif des sections efficaces de diffusion peuvent être éliminées.

Cet exercice constitue un prolongement de l'exercice précédent (qu'il est conseillé au lecteur d'étudier au préalable). Nous ne redéfinissons donc pas les notations déjà introduites.

A. Etude classique du champ rayonné

Soit $\alpha_{\mathbf{k}\epsilon}(t)$ la variable normale classique décrivant l'état du champ transverse classique dans le mode $\mathbf{k}\epsilon$. On rappelle que l'équation du mouvement de $\alpha_{\mathbf{k}\epsilon}(t)$ s'écrit (voir Appendice, formules (18.b) et (26)) :

$$\dot{\alpha}_{\mathbf{k}\epsilon}(t) + i \omega \alpha_{\mathbf{k}\epsilon}(t) = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega}} \epsilon_j(\mathbf{k},t) \quad (1)$$

$j(\mathbf{k},t)$ étant défini par

$$j(\mathbf{k},t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3\rho e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} \mathbf{j}(\mathbf{p},t) \quad (2)$$

où

$$\mathbf{j}(\mathbf{p},t) = q \dot{\mathbf{r}}(t) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{r}(t)) \quad (3)$$

est le courant associé à la charge q située en $\mathbf{r}(t)$ avec une vitesse $\dot{\mathbf{r}}(t)$.

La portée du potentiel diffuseur V_e est suffisamment petite pour qu'il soit possible d'utiliser l'approximation des grandes longueurs d'onde $|\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(t)| \ll 1$, non seulement pendant la collision ($t_1 \leq t \leq t_2$), mais également avant la collision ($t \leq t_1$) et après la collision ($t \geq t_2$). Par ailleurs, on néglige la réaction du rayonnement émis sur le mouvement de la particule, ce qui revient à considérer $\mathbf{r}(t)$ comme une fonction donnée du temps.

a) Soit \mathbf{v}_1 la vitesse de la particule avant la collision ($\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{v}_1$ si $t < t_1$). Montrer que, dans le cadre de l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'équation (1) admet pour $t \leq t_1$ une solution particulière $\beta_{\mathbf{k}\epsilon}(\mathbf{v}_1)$ indépendante du temps. Calculer $\beta_{\mathbf{k}\epsilon}(\mathbf{v}_1)$. Que représente physiquement le champ décrit par les variables normales $\{\beta_{\mathbf{k}\epsilon}(\mathbf{v}_1)\}$?

b) Montrer que la solution de l'équation (1), qui est égale à $\beta_{\mathbf{k}\epsilon}(\mathbf{v}_1)$ pour $t \leq t_1$, s'écrit pour $t \geq t_2$

$$\alpha_{\mathbf{k}\epsilon}(t) = \beta_{\mathbf{k}\epsilon}(\mathbf{v}_2) + \gamma_{\mathbf{k}\epsilon} e^{-i\omega t} \quad (4)$$

où \mathbf{v}_2 est la vitesse finale de la particule ($\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{v}_2$ pour $t \geq t_2$). Calculer $\gamma_{\mathbf{k}\epsilon}$ et montrer que $\gamma_{\mathbf{k}\epsilon}$ est proportionnel à la transformée de Fourier temporelle de l'accélération de la particule. Quel est le champ qui a été rayonné par la particule à l'issue du processus de diffusion ?

c) On considère la limite des basses fréquences $\omega\tau_c \ll 1$, où τ_c est la durée du processus de diffusion, de l'ordre de $t_2 - t_1$. Montrer que $\gamma_{\mathbf{k}\epsilon}$ ne dépend plus alors que de la variation de vitesse $\delta\mathbf{v} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$ de la particule au cours du processus de diffusion.

d) Calculer, à la limite des basses fréquences, l'énergie totale rayonnée par la particule dans les modes de fréquence inférieure à ω_m . On exprimera cette énergie totale en fonction de $\hbar\omega_m$, $\delta\mathbf{v}/c$ et de la constante de structure fine (la particule chargée est supposée être un électron).

B. Etude quantique et non perturbative du champ rayonné

Dans toute cette partie, on distingue deux catégories de modes : les « modes basse fréquence » $\mathbf{k}_\lambda \epsilon_\lambda$, notés avec un indice grec minuscule et tels que $\omega_\lambda < \omega_m$, et les modes haute fréquence $\mathbf{k}_A \epsilon_A$, notés avec un indice grec majuscule et tels que $\omega_m < \omega_A$ (*). Les contributions de ces deux types de modes à un opérateur champ, par exemple le vecteur de Hertz $\mathbf{Z}(\mathbf{r})$, seront notées $\mathbf{Z}^{b.f}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{Z}^{h.f}(\mathbf{r})$ (pour obtenir $\mathbf{Z}^{b.f}$ ou $\mathbf{Z}^{h.f}$ il suffit de remplacer $\mathbf{k}\epsilon$ par $\mathbf{k}_\lambda \epsilon_\lambda$ ou $\mathbf{k}_A \epsilon_A$ dans la formule (3) de l'exercice 8). Enfin, nous notons $|\{n_\lambda\}, \{n_A\}\rangle$ un état du champ où les n_λ sont les nombres de photons dans les modes $\mathbf{k}_\lambda \epsilon_\lambda$, et les n_A les nombres de photons dans les modes $\mathbf{k}_A \epsilon_A$, l'énergie d'un tel état étant $\sum_\lambda n_\lambda \hbar\omega_\lambda + \sum_A n_A \hbar\omega_A$.

(*) On suppose toutefois que ω_A n'est pas trop grand pour qu'il soit possible d'utiliser l'approximation des grandes longueurs d'onde, même pour les modes haute fréquence ($\omega_A < \omega_M$).

e) Dans l'hamiltonien de Pauli-Fierz (voir formule (1) de l'exercice 8), l'interaction particule-champ transverse n'apparaît que dans le terme $V_e(\mathbf{r} + \xi)$. Pour l'étude non perturbative présentée ici, il est préférable, plutôt que de développer $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ en puissances de ξ , de l'exprimer en fonction de la transformée de Fourier $\mathcal{V}_e(\mathbf{k})$ de $V_e(\mathbf{r})$ (voir équation (6) de l'exercice 8). Exprimer $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ en fonction de $\mathcal{V}_e(\mathbf{k})$ et des opérateurs $\exp(-i\mathbf{k.r})$ et $\exp(-i\mathbf{k.\xi})$.

f) Calculer, à l'ordre 1 en V_e et à tous les ordres en q , l'amplitude $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\})$ pour que la particule soit diffusée de \mathbf{p}_1 à \mathbf{p}_2 , avec émission de 0 photon haute fréquence et d'un certain nombre de photons basse fréquence caractérisés par l'ensemble $\{n_\lambda\}$. On pose toujours $\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{Q}$. On exprimera cette amplitude en fonction de $\mathcal{V}_e(\mathbf{Q})$ et d'éléments de matrice d'opérateurs de rayonnement faisant intervenir les parties haute et basse fréquence, $\xi^{h.f}$ et $\xi^{b.f}$, de ξ .

g) On suppose que les ω_λ sont si petits que l'on peut négliger complètement $\sum_\lambda n_\lambda \hbar \omega_\lambda$ devant E_1 et E_2 , et négliger aussi la différence entre $|\mathbf{p}_1|$ et $|\mathbf{p}_2|$ dans l'amplitude calculée dans la question f). Montrer que l'on peut écrire alors

$$\begin{aligned} & \mathcal{A}(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\}) = \\ & = \mathcal{A}_{el}(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}) \langle \{n_\lambda\} | \exp[-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b.f}] | \{0_\lambda\} \rangle \quad (5) \end{aligned}$$

où la première amplitude figurant au second membre de (5) est l'amplitude de diffusion élastique, à l'ordre 1 en V_e et à tous les ordres en q , calculée en ignorant complètement les modes basse fréquence. Montrer que

$$\sum_{\{n_\lambda\}} |\langle \{n_\lambda\} | \exp[-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b.f}] | \{0_\lambda\} \rangle|^2 = 1 \quad (6)$$

h) Montrer qu'à l'issue d'un processus de diffusion qui fait passer la particule de \mathbf{p}_1 à \mathbf{p}_2 sans émission d'aucun photon haute fréquence, l'état final du champ basse fréquence est $\exp[-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b.f}] | \{0_\lambda\} \rangle$.

i) Montrer que l'état du champ quantique rayonné à l'issue du processus de diffusion $\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}$ est l'état cohérent associé au champ classique rayonné au cours du même processus de diffusion. Que peut-on en conclure pour l'énergie moyenne du champ quantique rayonné à basse fréquence et pour la distribution du nombre de photons émis dans chaque mode basse fréquence ?

j) Le détecteur observant la particule diffusée dans la direction $\mathbf{n}_2 = \mathbf{p}_2/p_2$ a une résolution en énergie trop faible pour pouvoir détecter la perte d'énergie $\sum_\lambda n_\lambda \hbar \omega_\lambda$ de la particule due au rayonnement à basse

fréquence (c'est d'ailleurs cette résolution en énergie qui fixe la borne ω_m choisie pour séparer les deux types de modes). La probabilité de transition par unité de temps, mesurée par le détecteur, s'écrit donc :

$$dw_{\text{mesurée}}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) = \sum_{\{n_\lambda\}} dw(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\}) \quad (7)$$

En utilisant (5) et (6), montrer que $dw_{\text{mesurée}}$ est simplement égale à la probabilité de transition élastique par unité de temps $dw_e(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\})$ calculée en ignorant complètement les modes basse fréquence.

Généraliser le résultat précédent à d'autres processus où des photons haute fréquence sont émis, par exemple dans la diffusion $\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{n_A\}, \{n_\lambda\}$.

Solution

a) Reportons (3) dans (2), puis (2) dans (1). En approximant $\exp[-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(t)]$ par 1, nous obtenons alors

$$\dot{\alpha}_{ke}(t) + i\omega \alpha_{ke}(t) = \frac{iq}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega L^3}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}(t) \quad (8)$$

Avant la collision ($t \leq t_1$), la particule n'est pas dans la zone d'action du potentiel diffuseur V_e . Sa vitesse $\mathbf{r}(t)$ est donc constante et égale à \mathbf{v}_1 . Le second membre de (8) est alors indépendant du temps, ce qui montre que l'équation (8) admet, pour $t \leq t_1$, la solution particulière

$$\beta_{ke}(\mathbf{v}_1) = \frac{q}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega^3 L^3}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_1 \quad (9)$$

indépendante du temps. Cette solution représente la valeur de la variable normale associée au mode ke pour le champ transverse lié à la particule incidente, qui est en mouvement de translation uniforme (voir complément B_H , § 1-b).

b) Après la collision ($t \geq t_2$), la particule est de nouveau libre, avec la vitesse \mathbf{v}_2 . La solution générale de l'équation (8) est alors la somme d'une solution particulière de l'équation avec second membre, analogue à (9) avec \mathbf{v}_1 remplacé par \mathbf{v}_2 , et de la solution générale de l'équation sans second membre, qui varie en $\exp(-i\omega t)$ et peut donc être écrite $\gamma_{ke} \exp(-i\omega t)$:

$$\alpha_{ke}(t) = \beta_{ke}(\mathbf{v}_2) + \gamma_{ke} e^{-i\omega t} \quad (10)$$

Les deux termes de (10) décrivent respectivement le champ transverse « lié » à la particule diffusée s'éloignant de la zone d'action de V_e et le champ transverse libre qui est apparu à l'issue de la collision et qui est donc le champ transverse rayonné par la particule chargée.

Pour calculer γ_{ke} , intégrons formellement l'équation (8) entre t_1 et $t > t_2$. Il vient

$$\alpha_{ke}(t) = \alpha_{ke}(t_1) e^{-i\omega(t-t_1)} + \frac{iq}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega L^3}} \int_{t_1}^t \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}(t') e^{i\omega(t'-t)} dt' \quad (11)$$

L'identification de $\alpha_{ke}(t_1)$ avec (9) et de $\alpha_{ke}(t)$ avec (10) donnent alors :

$$\begin{aligned}\gamma_{ke} &= \frac{-q}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega^3L^3}} [\mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_2 e^{i\omega t} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_1 e^{i\omega t}] + \frac{iq}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega L^3}} \int_{t_1}^t \mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{r}}(t') e^{i\omega t'} dt' \\ &= -\frac{q}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega^3L^3}} \int_{t_1}^t \mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{r}}(t') e^{i\omega t'} dt'\end{aligned}\quad (12)$$

Comme $\dot{\mathbf{r}}(t')$ est nul pour $t' < t_1$ et $t' > t_2$ puisque la particule est alors en mouvement uniforme, il est possible de remplacer $\int_{t_1}^t$ par $\int_{-\infty}^{+\infty}$ dans (12), ce qui fait apparaître la composante de Fourier à la fréquence ω de l'accélération de la particule. Un tel résultat confirme l'interprétation donnée plus haut du dernier terme de (10) comme décrivant le champ rayonné par la particule.

c) Si $\omega(t_2 - t_1) \ll 1$, on peut approximer l'exponentielle de l'intégrale de (12) par 1, ce qui permet de remplacer cette intégrale par $\mathbf{e} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) = \mathbf{e} \cdot \delta\mathbf{v}$. Il vient alors

$$\gamma_{ke} = -\frac{q}{\sqrt{2\varepsilon_0\hbar\omega^3L^3}} \mathbf{e} \cdot \delta\mathbf{v} \quad (13)$$

d) L'énergie totale du champ libre décrit par les variables normales $\{\gamma_{ke} \exp(-i\omega t)\}$ et de fréquence $\omega \leq \omega_m$ s'écrit, compte tenu de (13)

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{b,f} &= \sum_{ke} \hbar\omega \gamma_{ke}^* \gamma_{ke} = \int_0^{k_m} \frac{k^2 dk}{(2\pi/L)^3} \int d\Omega \sum_e \hbar\omega \gamma_{ke}^* \gamma_{ke} = \\ &= \frac{q^2}{2\varepsilon_0(2\pi)^3 c^3} \int_0^{\omega_m} d\omega \int d\Omega \sum_e \sum_{i,j=\substack{x,y,z}} \epsilon_i \epsilon_j \delta v_i \delta v_j\end{aligned}\quad (14)$$

L'expression (14) représente l'énergie rayonnée à basse fréquence ($\omega < \omega_m$) par la particule. L'utilisation de la relation (54) du complément A₁ donne

$$\int d\Omega \sum_e \epsilon_i \epsilon_j = \int d\Omega \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = \frac{8\pi}{3} \delta_{ij} \quad (15)$$

et par suite

$$\mathcal{H}_{b,f} = \frac{q^2 \omega_m}{6\varepsilon_0 \pi^2 c^3} (\delta\mathbf{v})^2 = \frac{2\alpha}{3\pi} \left(\frac{\delta\mathbf{v}}{c} \right)^2 \hbar\omega_m \quad (16)$$

où $\alpha = q^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$ est la constante de structure fine. Il apparaît clairement sur (16) que $\mathcal{H}_{b,f} \ll \hbar\omega_m$.

e) L'inversion de la formule (6) de l'exercice 8 donne

$$V_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathcal{V}_e(\mathbf{k}) \quad (17)$$

Il suffit alors de remplacer \mathbf{r} par $\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}$ et d'utiliser le fait que \mathbf{r} et $\boldsymbol{\xi} = q \mathbf{Z}(\mathbf{0})/m$ commutent pour obtenir

$$V_e(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{V}_e(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\xi}) \quad (18)$$

f) Calculons tout d'abord l'élément de matrice de $V_e(\mathbf{r} + \xi)$ entre $|\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\}\rangle$ et $|\mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\}\rangle$. Comme $\xi = \xi^{h,f} + \xi^{b,f}$ et que $\xi^{h,f}$ et $\xi^{b,f}$ commutent, cet élément de matrice se factorise en trois parties. La partie relative à la particule s'écrit

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{V}_e(\mathbf{k}) \langle \mathbf{p}_2 | \exp(-i\mathbf{k.r}) | \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{V}_e(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 + \mathbf{k}} = \frac{\mathcal{V}_e(\mathbf{Q})}{L^3} \quad (19)$$

Quant aux deux autres parties relatives à $\xi^{h,f}$ et $\xi^{b,f}$, elles valent respectivement, compte tenu du $\delta_{\mathbf{k.Q}}$ apparaissant dans (19), $\langle \{0_A\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{h,f}) | \{0_A\} \rangle$ et $\langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle$.

Le regroupement des résultats précédents donne

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\}) &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2 - \sum_{\lambda} n_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda}) \times \\ &\times \frac{\mathcal{V}_e(\mathbf{Q})}{L^3} \langle \{0_A\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{h,f}) | \{0_A\} \rangle \langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

g) Si $\sum_{\lambda} n_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda}$ est négligeable devant E_1 et E_2 , on peut remplacer la fonction $\delta^{(T)}$ de (20) par $\delta^{(T)}(E_1 - E_2)$. On peut également négliger la différence entre $|\mathbf{p}_1\rangle$ et $|\mathbf{p}_2\rangle$ et remplacer \mathbf{Q} par la valeur correspondant à la diffusion élastique. Les modes basse fréquence n'interviennent plus alors que dans le dernier élément de matrice de (20). On obtient ainsi l'égalité (5) où

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_e(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}) &= -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2) \times \\ &\times \langle \{0_A\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{h,f}) | \{0_A\} \rangle \mathcal{V}_e(\mathbf{Q}) / L^3 \end{aligned} \quad (21)$$

ne dépend pas des modes basse fréquence.

Pour démontrer (6), il suffit d'écrire le premier membre de (6) sous la forme

$$\langle \{0_\lambda\} | \exp(i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) \left[\sum_{\{n_\lambda\}} | \{n_\lambda\} \rangle \langle \{n_\lambda\}| \right] \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle \quad (22)$$

Comme les opérateurs $\exp(\pm i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f})$ n'agissent que dans le sous-espace des photons basse fréquence, et que l'opérateur figurant entre crochets dans (22) n'est autre que l'opérateur unité dans ce sous-espace (relation de fermeture), l'expression (22) se réduit à $\langle \{0_\lambda\} | \{0_\lambda\} \rangle = 1$.

h) La factorisation de l'expression (5) montre que, si la particule a été diffusée de \mathbf{p}_1 à \mathbf{p}_2 sans émission d'aucun photon haute fréquence, les coefficients du développement de l'état final du champ basse fréquence sur les états $| \{n_\lambda\} \rangle$ sont proportionnels à $\langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle$. La condition de normalisation (6) montre alors que $\langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle$ est bien l'amplitude de probabilité de trouver le champ basse fréquence dans l'état $| \{n_\lambda\} \rangle$. On en déduit que l'état final du champ basse fréquence (à l'issue du processus de diffusion $\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}$) s'écrit :

$$\begin{aligned} |\psi_{fin}^{b,f}\rangle &= \sum_{\{n_\lambda\}} | \{n_\lambda\} \rangle \langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle \\ &= \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle \end{aligned} \quad (23)$$

puisque les états $| \{n_\lambda\} \rangle$ forment une base dans le sous-espace des états des photons basse fréquence.

i) Remplaçons dans (23) \mathbf{Q} par $(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/\hbar = -m \delta \mathbf{v}/\hbar$ où $\delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$, puis $\xi^{b,f}$ par $q \mathbf{Z}^{b,f}(0)/m$. En utilisant le développement de $\mathbf{Z}^{b,f}(0)$ en a_{ke}^+ et a_{ke}^- avec $\omega < \omega_n$ (voir formule (3) de l'exercice 8), on obtient

$$\exp[-i\mathbf{Q}\cdot\xi^{b,f}] = \exp\left\{-\sum_{ke}^{b,f} [\gamma_e^*(\mathbf{k})a_{ke} - \gamma_e(\mathbf{k})a_{ke}^+]\right\} \quad (24)$$

où γ_{ke} est donné en (13). On en déduit (voir formules (65) à (67) de l'appendice) que $\exp[-i\mathbf{Q}\cdot\xi^{b,f}]$ est un opérateur de translation pour a_{ke}

$$\exp[+i\mathbf{Q}\cdot\xi^{b,f}] a_{ke} \exp[-i\mathbf{Q}\cdot\xi^{b,f}] = a_{ke} + \gamma_{ke} \quad (25)$$

et que $|\psi_{fin}^{b,f}\rangle$ est l'état cohérent correspondant au champ classique rayonné à basse fréquence

$$|\psi_{fin}^{b,f}\rangle = |\{\gamma_{ke}\}\rangle \quad (26)$$

Le résultat (26) et les propriétés des états cohérents entraînent que la valeur moyenne de l'énergie du champ quantique rayonné à basse fréquence est égale à l'énergie classique correspondante, donnée par l'équation (16). De même, la distribution du nombre de photons ke émis est celle d'une loi de Poisson de moyenne $|\gamma_{ke}|^2$.

Finalement, dans le calcul non perturbatif présenté dans cet exercice, aucune divergence infrarouge n'apparaît dans les prédictions physiques concernant les photons basse fréquence émis. De plus, le lien avec la théorie classique apparaît très clairement grâce au résultat (26).

ii) Elevons (5) au carré en module et divisons par la durée de l'interaction. On obtient pour les probabilités de transition par unité de temps :

$$dw(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}, \{n_\lambda\}) = dw_e(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}) |\langle \{n_\lambda\} | \exp(-i\mathbf{Q}\cdot\xi^{b,f}) | \{0_\lambda\} \rangle|^2 \quad (27)$$

où le premier terme du second membre, dw_e , est indépendant des modes basse fréquence. La somme sur $\{n_\lambda\}$ de (27) donne alors, compte tenu de (6)

$$dw_{mesurée}(\mathbf{p}_1 \rightarrow \mathbf{p}_2) = dw_e(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\}) \quad (28)$$

La grandeur mesurée ne dépend donc plus des modes basse fréquence.

Tous les raisonnements précédents se généralisent aisément aux processus où des photons haute fréquence sont également émis. Il suffit de remplacer dans (5) $\mathcal{A}_e(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{0_A\})$ par l'amplitude $\mathcal{A}(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{n_A\})$ donnée par l'équation suivante généralisant (21)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathbf{p}_1, \{0_A\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{n_A\}) = & -2\pi i \delta^{(T)}(E_1 - E_2 - \sum_A n_A \hbar \omega_A) \times \\ & \times \langle \{n_A\} | \exp(-i\mathbf{Q}\cdot\xi^{h,f}) | \{0_A\} \rangle \mathcal{V}_e(\mathbf{Q})/L^3 \end{aligned} \quad (29)$$

Dans (29), $|\mathbf{p}_1|$ n'est bien sûr pas égal à $|\mathbf{p}_2|$. Comme l'amplitude (29) ne dépend pas des modes basse fréquence, on peut, comme plus haut, utiliser (6) pour montrer que la grandeur mesurée

$$\sum_{(n_A)} dw(\mathbf{p}_1, \{0_A\}, \{0_\lambda\} \rightarrow \mathbf{p}_2, \{n_A\}, \{n_\lambda\}) \quad (30)$$

ne dépend pas des modes basse fréquence.

Nous avons ainsi établi de manière rigoureuse et non perturbative que les grandeurs significatives expérimentalement ne dépendent pas des modes basse fréquence.

10. MODIFICATION DE LA FRÉQUENCE CYCLOTRON D'UNE PARTICULE PAR INTERACTION AVEC LE RAYONNEMENT

Le but de cet exercice est d'étudier comment l'interaction avec le champ de rayonnement modifie le mouvement cyclotron d'une particule chargée placée dans un champ magnétique statique B_0 . On décrira par un hamiltonien effectif la modification du mouvement lent de la particule due au couplage avec les modes haute fréquence du champ de rayonnement.

Soit m la masse de la particule, q sa charge. Le champ magnétique \mathbf{B}_0 , uniforme, est décrit par le potentiel vecteur

$$\mathbf{A}_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{r}) \quad (1)$$

et est parallèle à l'axe $0z$. L'hamiltonien de la particule (supposée sans spin) est :

$$H_P = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q \mathbf{A}_0(\mathbf{r})]^2 \quad (2)$$

a) Déterminer l'expression des trois composantes v_x, v_y, v_z de l'opérateur vitesse en fonction de \mathbf{p} et \mathbf{r} . Calculer leurs relations de commutation. Ecrire les équations de Heisenberg des composantes de la vitesse. En déduire leur mouvement et l'expression de la fréquence cyclotron ω_c .

b) On commence par étudier l'effet de l'interaction de la particule avec un mode particulier du champ transverse de vecteur d'onde \mathbf{k} et de polarisation ϵ , dont la fréquence ω est supposée grande devant la fréquence cyclotron

$$\omega_c \ll \omega \quad (3)$$

L'hamiltonien du système est alors

$$H = H_0 + H_I \quad (4)$$

où

$$H_0 = H_P + \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}) \quad (5)$$

$$H_I = -q \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}) \quad (6)$$

avec

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}_\omega(\epsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a + \epsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a^+) , \quad (7)$$

\mathcal{A}_ω étant une constante égale à $(\hbar/2\epsilon_0\omega L^3)^{\frac{1}{2}}$.

Montrer que, pour les états de la particule d'énergie faible, il existe une large gamme de fréquence ω pour laquelle l'approximation des grandes longueurs d'onde est justifiée. On se placera dans ce cas dans toute la suite.

c) En utilisant les résultats du complément B_1 , déterminer l'hamiltonien effectif qui décrit la dynamique de la particule en présence du vide de rayonnement, au deuxième ordre en q et dans l'approximation $\omega_c/\omega \ll 1$. Calculer la projection de la vitesse de la particule sur le vecteur polarisation ϵ ainsi que l'énergie cinétique du mouvement correspondant. Interpréter physiquement le résultat obtenu.

d) La particule interagit maintenant avec tous les modes de fréquence comprise entre ck_m et ck_M

$$ck_m < \omega < ck_M \quad (8)$$

La borne supérieure est fixée par l'approximation des grandes longueurs d'onde ; la borne inférieure est prise supérieure à ω_c , de manière à pouvoir utiliser les résultats de c) pour chacun de ces modes.

Montrer que l'on peut sommer indépendamment les hamiltoniens effectifs associés à chacun des modes pour décrire le mouvement de la particule en présence du vide. Comment est modifiée la fréquence cyclotron ?

Solution

a) L'opérateur vitesse de la particule en présence du potentiel vecteur $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$ est :

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} (\mathbf{p} - q \mathbf{A}_0(\mathbf{r})) \quad (9)$$

soit

$$v_x = \frac{1}{m} (p_x + \frac{q}{2} B_0 y) ; \quad v_y = \frac{1}{m} (p_y - \frac{q}{2} B_0 x) ; \quad v_z = \frac{p_z}{m} \quad (10)$$

v_x commute avec v_x et v_y , et

$$[v_x, v_y] = i \hbar \frac{q}{m^2} B_0 \quad (11)$$

L'hamiltonien de la particule, qui décrit son énergie cinétique, peut s'écrire :

$$H_P = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \quad (12)$$

Considérons alors les équations de Heisenberg relatives aux composantes de \mathbf{v}

$$\dot{v}_x = \frac{i}{\hbar} [H_P, v_x] = \frac{im}{2\hbar} [v^2, v_x] = \frac{im}{2\hbar} [v_y^2, v_x] = \frac{q}{m} B_0 v_y \quad (13.a)$$

$$\dot{v}_y = \frac{i}{\hbar} [H_P, v_y] = \frac{im}{2\hbar} [v_x^2, v_y] = -\frac{q}{m} B_0 v_x \quad (13.b)$$

v_x et v_y évoluent selon deux mouvements oscillant en quadrature à la fréquence cyclotron

$$\omega_c = -\frac{q}{m} B_0 \quad (14)$$

L'équation relative à v_z s'écrit :

$$\dot{v}_z = \frac{i}{\hbar} [H_p, v_z] = 0 \quad (15)$$

et montre que le mouvement le long de $0z$ est uniforme.

b) La relation de commutation (11) entraîne la relation d'incertitude

$$\langle v_x^2 \rangle \langle v_y^2 \rangle \geq \left(\frac{\hbar q B_0}{2m^2} \right)^2 \quad (16)$$

Cette relation fixe l'ordre de grandeur de la vitesse dans les niveaux d'énergie (appelés «niveaux de Landau») (*) les plus bas

$$v^4 \sim \left(\frac{\hbar q B_0}{m^2} \right)^2 \quad (17)$$

soit

$$v \sim \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{m}} \quad (18)$$

Le mouvement étant périodique, de période $2\pi/\omega_c$, l'extension spatiale des fonctions d'onde est de l'ordre de

$$a \sim v \frac{1}{\omega_c} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_c}} \quad (19)$$

Pour que l'approximation des grandes longueurs d'onde soit valable, il faut que

$$ka \ll 1 \quad (20)$$

soit

$$\frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_c}} \ll 1 \quad (21)$$

Les conditions (3) et (21) entraînent alors que ω doit vérifier

$$\omega_c \ll \omega \ll \sqrt{\omega_c \frac{(mc^2)}{\hbar}} \quad (22)$$

Pour un champ magnétique de 1 Tesla, cette gamme s'étend des microondes au visible.

Dans la direction $0z$, la particule est libre, et donc non localisée. On pourra supposer qu'un potentiel approprié la maintient au voisinage de $z = 0$ avec une extension vérifiant aussi la condition (20).

c) Supposons la particule localisée au voisinage de l'origine : $r \approx 0$. A l'approximation des

(*) Voir par exemple Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë, complément E_{VI} .

grandes longueurs d'onde, le terme $q^2 A^2(0)/2m$ ne dépend que des variables du champ et l'hamiltonien de couplage entre le champ et la particule se réduit à

$$H_{I1} = -qv \cdot A(0) = -q(\epsilon \cdot v) \mathcal{A}_\omega (a + a^\dagger) \quad (23)$$

Dans la multiplicité correspondant au vide $|0\rangle$, $\langle a + a^\dagger \rangle$ est nul. Le mouvement de la particule est caractérisé par la fréquence ω_c très petite par rapport à celle du mode $(k \epsilon)$. On peut donc appliquer directement les résultats du paragraphe 4 du complément B_1 .

L'expression de l'hamiltonien effectif est :

$$\begin{aligned} (H' P)^{k, \epsilon}_{\text{vide}} &= H_P + \frac{q^2}{2m} \langle 0 | A^2(0) | 0 \rangle + \\ &+ q^2 \mathcal{A}_\omega^2 \langle 0 | (a + a^\dagger) \frac{1}{\frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})} (a + a^\dagger) | 0 \rangle (\epsilon \cdot v)^2 - \\ &- \frac{q^2 \mathcal{A}_\omega^2}{2} \langle 0 | (a + a^\dagger) \frac{1}{\left[\frac{\hbar\omega}{2} - \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \right]^2} (a + a^\dagger) | 0 \rangle [\epsilon \cdot v, [\epsilon \cdot v, H_P]] + \dots \\ &= \frac{1}{2} mv^2 + \frac{q^2}{2m} \mathcal{A}_\omega^2 - \frac{q^2 \mathcal{A}_\omega^2}{\hbar\omega} (\epsilon \cdot v)^2 - \frac{mq^2 \mathcal{A}_\omega^2}{4\hbar^2 \omega^2} [\epsilon \cdot v, [\epsilon \cdot v, v^2]] + \dots \end{aligned} \quad (24)$$

Le double commutateur se réduit à

$$\begin{aligned} [\epsilon_x v_x + \epsilon_y v_y, [\epsilon_x v_x + \epsilon_y v_y, v_x^2 + v_y^2]] &= \epsilon_x^2 [v_x, [v_x, v_y^2]] + \epsilon_y^2 [v_y, [v_y, v_x^2]] \\ &= -2(\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2) (\hbar q B_0 / m^2)^2 \end{aligned} \quad (25)$$

et on obtient finalement

$$(H' P)^{k, \epsilon}_{\text{vide}} = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} \delta m_{ke} (\epsilon \cdot v)^2 + \frac{q^2}{2m} \mathcal{A}_\omega^2 [1 + (\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2)(\omega_c/\omega)^2] + \dots \quad (26)$$

avec

$$\delta m_{ke} = \frac{2q^2 \mathcal{A}_\omega^2}{\hbar\omega} \quad (27)$$

Le couplage avec le mode k, ϵ introduit une correction du terme d'énergie cinétique dans l'hamiltonien effectif qui décrit le mouvement lent de la particule. Cette correction est anisotrope, nulle pour les composantes de v perpendiculaires à ϵ , et non nulle pour le mouvement le long de la direction ϵ . La vitesse du mouvement lent le long de ϵ , qui s'écrit

$$\epsilon \cdot r = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} (m - \delta m_{ke}) (\epsilon \cdot v)^2, (\epsilon \cdot r) \right] = \left(1 - \frac{\delta m_{ke}}{m} \right) (\epsilon \cdot v) \quad (28)$$

est représentée par l'opérateur

$$v'_\epsilon = \left(1 - \frac{\delta m_{ke}}{m} \right) v_\epsilon \quad (29)$$

Dans l'hamiltonien effectif l'énergie cinétique correspondante s'écrit (à l'ordre 2 en q)

$$\frac{1}{2} (m - \delta m_{ke}) v_\epsilon^2 = \frac{1}{2} (m + \delta m_{ke}) (v'_\epsilon)^2 \quad (30)$$

Tout se passe comme si l'inertie de la particule avait augmenté dans la direction ϵ .

Pour le dernier terme de (26), on peut proposer l'interprétation suivante. Dans l'hamiltonien initial, le terme $(q^2/2m) \mathcal{A}_\omega^2$ représente l'énergie cinétique de vibration de la particule sous l'action des fluctuations du vide du mode $k\epsilon$. En présence du champ magnétique, le mouvement de vibration de la particule dans le plan $x-y$ est modifié par le champ magnétique qui courbe la trajectoire et fait apparaître un moment magnétique orbital proportionnel à B_0 . Le dernier terme de (26) représente l'énergie diamagnétique associée à ce mouvement induit (*).

d) Le couplage H_{II} s'écrit maintenant

$$H_{II} = -q \sum_i (\epsilon_i \cdot \mathbf{v}) \mathcal{A}_{\omega_i} (a_i + a_i^+) \quad (31)$$

Il est linéaire en a et a^+ , de sorte que dans le terme du deuxième ordre de l'hamiltonien effectif n'apparaissent que des états intermédiaires à un seul photon $|k_i \epsilon_i\rangle$. Le calcul de la contribution correspondant à cet état peut se faire en tenant compte du seul couplage avec le mode $k_i \epsilon_i$. Ceci revient donc à sommer sur i les hamiltoniens effectifs $(H'_P)_{\text{vide}}^i$.

$$(H'_P)_{\text{vide}} = \sum_{\substack{i \\ k_m < k_i < k_M}} (H'_P)_{\text{vide}}^i \quad (32)$$

La somme sur ϵ et ϵ' et la moyenne angulaire sur les angles polaires de \mathbf{k} donnent, après passage à la limite continue (voir la formule (55) du complément A_I)

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} \sum_{\epsilon} (\epsilon \cdot \mathbf{v})^2 = \frac{2}{3} \mathbf{v}^2 \quad (33)$$

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} \sum_{\epsilon} \epsilon_x^2 = \frac{2}{3} \quad (34)$$

et une formule analogue pour la moyenne de ϵ_y^2 . Il vient alors

$$(H'_P)_{\text{vide}} = \frac{1}{2} (m - \delta m) \mathbf{v}^2 + \frac{q^2}{2m} \int_{k_m}^{k_M} 4\pi k^2 dk \frac{\mathcal{A}_\omega^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \left[1 + \frac{4}{3} \frac{\omega_c^2}{\omega^2} \right] \quad (35)$$

où

$$\begin{aligned} \delta m &= \frac{2}{3} \int \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \delta m_{k\epsilon} = \frac{16\pi}{3} \int_{k_m}^{k_M} k^2 dk \frac{q^2}{\hbar\omega} \left[\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega(2\pi)^3} \right] \\ &= \frac{1}{3\pi^2} \int_{k_m}^{k_M} dk \frac{q^2}{\epsilon_0 c^2} = \frac{q^2(k_M - k_m)}{3\epsilon_0\pi^2 c^2} = \frac{q^2 k_M}{3\epsilon_0\pi^2 c^2} \end{aligned} \quad (36)$$

(k_m est très petit devant k_M et peut être négligé). On retrouve bien la correction de masse δm déjà calculée dans le complément B_{II} (voir formule (32)).

(*) Pour une discussion plus détaillée, voir par exemple, P. Avan, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et C. Fabre, J. Physique 37, 993 (1976).

Le deuxième terme de (35) est constant et ne change pas la dynamique de la particule. Revenant aux opérateurs fondamentaux \mathbf{r} et \mathbf{p} , le premier terme s'écrit :

$$\frac{1}{2} \frac{m - \delta m}{m^2} [\mathbf{p} - q \mathbf{A}_0(\mathbf{r})]^2 \quad (37)$$

c'est-à-dire encore, à l'ordre 1 en δm

$$\frac{1}{2m} \left(1 - \frac{\delta m}{m} \right) [\mathbf{p} - q \mathbf{A}_0(\mathbf{r})]^2 \approx \frac{1}{2(m + \delta m)} [\mathbf{p} - q \mathbf{A}_0(\mathbf{r})]^2 \quad (38)$$

Tout se passe comme si la masse de la particule avait augmenté de δm de sorte que la fréquence cyclotron devient

$$\omega'_c = -\frac{q}{m + \delta m} B_0 \approx \omega_c \left(1 - \frac{\delta m}{m} \right) \quad (39)$$

Le mouvement cyclotron est donc ralenti par l'augmentation de la masse.

11. INTERACTIONS MAGNÉTIQUES ENTRE SPINS

Le but de cet exercice est d'étudier une transformation unitaire faisant apparaître explicitement dans l'hamiltonien des particules l'interaction de contact de Fermi et l'interaction dipôle-dipôle entre deux spins. Dans le point de vue habituel, ces interactions sont dues à un échange de photons transverses entre les deux spins. Pour simplifier au maximum les calculs, les particules portant les spins seront supposées ici fixes (nous ignorons donc les interactions magnétiques liées au mouvement de translation des particules, comme l'interaction courant-courant, déjà étudiée dans le paragraphe F-1 du chapitre II, ou l'interaction spin-autre orbite).

On considère des spins $S_\alpha, S_\beta \dots$ situés en des points fixes $\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\beta \dots$. Ces spins interagissent, d'une part, avec le champ de rayonnement quantifié, d'autre part, avec un champ magnétique statique \mathbf{B}_0 . L'hamiltonien de ce système est, dans le point de vue habituel :

$$H = H_R - \sum_\alpha \gamma_\alpha \mathbf{S}_\alpha \cdot [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha)] \quad (1)$$

où H_R est l'hamiltonien du rayonnement libre :

$$H_R = \int d^3k \sum_\epsilon \hbar\omega [a_\epsilon^+(\mathbf{k}) a_\epsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}] \quad (2)$$

Le rapport gyromagnétique γ_α est égal à $g_\alpha q_\alpha / 2m_\alpha$ où g_α est le facteur g de la particule α , de masse m_α et de charge q_α . $\mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha)$ est le champ magnétique du rayonnement au point \mathbf{r}_α .

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) = i & \int d^3k \sum_\epsilon \left(\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 c^2 (2\pi)^3} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times [a_\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\alpha} - a_\epsilon^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\alpha}] (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}) \end{aligned} \quad (3)$$

On décompose H en trois termes : H_R , qui est d'ordre 0 en charge électrique q_α , $H_I = - \sum_\alpha \gamma_\alpha \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha)$ qui correspond à l'interaction entre les spins et le champ de rayonnement $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ et qui est d'ordre 1 en q_α , et $H_S = - \sum_\alpha \gamma_\alpha \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{B}_0$ qui correspond à l'interaction entre les spins et le champ magnétique extérieur.

a) Considérons d'abord le cas $B_0 = 0$. On se propose de faire, sur l'hamiltonien H , une transformation unitaire $T = \exp(iF/\hbar)$, F étant d'ordre 1 en q_α , telle que le terme linéaire en q_α de l'hamiltonien transformé $H' = T H T^+$ soit nul. Quelle est la relation vérifiée par F ? On pourra utiliser l'identité

$$e^{iA} B e^{-iA} = B + i [A, B] + \frac{i^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (4)$$

b) L'opérateur F est pris de la forme

$$F = i\hbar \sum_{\alpha} \int d^3k \sum_{\epsilon} [\beta_{\alpha}(\mathbf{k}, \epsilon) a_{\epsilon}^{+}(\mathbf{k}) - \beta_{\alpha}^{+}(\mathbf{k}, \epsilon) a_{\epsilon}(\mathbf{k})] \quad (5)$$

Calculer $\beta_{\alpha}(\mathbf{k}, \epsilon)$ et vérifier que

$$F = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} [\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_{\alpha})] \cdot \mathbf{S}_{\alpha} \quad (6)$$

où $\mathbf{Z}(\mathbf{r})$ est le champ quantique vectoriel

$$\mathbf{Z}(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_{\epsilon} \left[\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega(2\pi)^3} \right]^{\frac{1}{2}} \epsilon \left[\frac{a_{\epsilon}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{i\omega} - \frac{a_{\epsilon}^{+}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{i\omega} \right] \quad (7)$$

c) Donner les termes d'ordre inférieur ou égal à 2 en q_{α} de l'hamiltonien transformé H' . Montrer que les interactions magnétiques entre spins différents (interaction de contact de Fermi et interaction dipôle-dipôle) apparaissent explicitement dans H' . Montrer qu'apparaissent également des termes d'énergie propre pour chaque spin. Pour calculer ces termes, on introduira une coupure ($|\mathbf{k}| \leq k_c$) dans le développement en modes des champs transverses.

Quel est le nouvel hamiltonien d'interaction entre spins et champ transverse ?

d) Le champ B_0 est supposé maintenant non nul. Calculer, en utilisant la même transformation unitaire que précédemment et en se limitant aux deux premiers termes de (4), l'opérateur H'_s transformé de H_s . Montrer qu'il apparaît maintenant un nouveau terme d'interaction entre les spins et le champ de rayonnement, linéaire en a et a^{+} . Interpréter physiquement la dépendance de ce terme en B_0 .

Solution

a) En utilisant (4), nous trouvons que H' s'exprime en fonction de F sous la forme d'un développement :

$$\begin{aligned} H' &= e^{iF/\hbar} H e^{-iF/\hbar} \\ &= H + \frac{i}{\hbar} [F, H] + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 [F, [F, H]] + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

Regroupons les termes de même ordre en puissances de q_{α} . Il vient, comme F est d'ordre 1 en q_{α}

$$\begin{aligned} \text{terme d'ordre 0} &\quad H_R \\ \text{terme d'ordre 1} &\quad H_I + \frac{i}{\hbar} [F, H_R] \\ \text{terme d'ordre 2} &\quad \frac{i}{\hbar} [F, H_I] + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 [F, [F, H_R]] \end{aligned}$$

Pour que le terme d'ordre 1 soit nul, il faut que

$$H_I + \frac{i}{\hbar} [F, H_R] = 0 \quad (9)$$

b) En utilisant la forme de F donnée dans l'énoncé et les commutateurs

$$[a_\epsilon(\mathbf{k}), a_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (10)$$

nous obtenons

$$i \left[\frac{F}{\hbar}, H_R \right] = \sum_\alpha \int d^3k \sum_\epsilon [\beta_\alpha^+(\mathbf{k}, \epsilon) a_\epsilon(\mathbf{k}) + \beta_\alpha(\mathbf{k}, \epsilon) a_\epsilon^+(\mathbf{k})] \hbar \omega \quad (11)$$

Or, d'après (1) et (3), H_I est égal à

$$\begin{aligned} H_I = & -i \sum_\alpha \int d^3k \sum_\epsilon \gamma_\alpha \left[\frac{\hbar \omega}{2 \epsilon_0 c^2 (2\pi)^3} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times [S_\alpha \cdot (\mathbf{k} \times \epsilon)] [a_\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha} - a_\epsilon^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha}] \end{aligned} \quad (12)$$

La condition (9) entraîne que les facteurs des opérateurs d'annihilation et de création sont opposés dans (11) et (12), ce qui conduit à :

$$\beta_\alpha(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{-i \gamma_\alpha S_\alpha \cdot (\mathbf{k} \times \epsilon) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha}}{\sqrt{2 \epsilon_0 c^2 \hbar \omega (2\pi)^3}} \quad (13)$$

Reportons cette expression dans la formule (5) donnant F . Nous voyons apparaître le développement du champ vectoriel $\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha)$, $\mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha)$ étant défini par (7), et nous obtenons finalement la relation (6) de l'énoncé.

c) Le terme d'ordre 0 de H' est l'hamiltonien du rayonnement H_R ; le terme d'ordre 1 est nul par suite de la condition (9) imposée à la transformation unitaire. Quant au terme d'ordre 2, il est égal à

$$H'_2 = \left[\frac{iF}{\hbar}, H_I \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{iF}{\hbar}, \left[\frac{iF}{\hbar}, H_R \right] \right] \quad (14.a)$$

c'est-à-dire encore en utilisant (9) pour transformer le second commutateur

$$H'_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{iF}{\hbar}, H_I \right] \quad (14.b)$$

Les équations (1) et (6) permettent de réécrire H'_2 sous la forme

$$\begin{aligned} H'_2 = & -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i,j} \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{\hbar} [(\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_i (S_\alpha)_i, B_j(\mathbf{r}_\beta) (S_\beta)_j] \\ = & -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i,j} \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{\hbar} \{ [(\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_i, B_j(\mathbf{r}_\beta)] (S_\alpha)_i (S_\beta)_j + \\ & + (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_i B_j(\mathbf{r}_\beta) [(S_\alpha)_i, (S_\beta)_j] \} \end{aligned} \quad (15)$$

Le commutateur relatif aux opérateurs des particules est

$$[(S_\alpha)_i, (S_\beta)_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \delta_{\alpha\beta} (S_\alpha)_k \quad (16)$$

ϵ_{ijk} étant le tenseur antisymétrique. Calculons, en utilisant (3), (7) et (10), ainsi que la

formule (33) de l'appendice, le commutateur entre les opérateurs de rayonnement

$$\begin{aligned}
 [(\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_i, B_j(\mathbf{r}_\beta)] &= i \int d^3k \int d^3k' \sum_{\epsilon, \epsilon'} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 c^2 (2\pi)^3} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^t \times \\
 &\quad \times \{ -[a_\epsilon(\mathbf{k}), a_\epsilon^+(\mathbf{k}')](\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_i (\mathbf{k}' \times \boldsymbol{\epsilon}')_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_\beta} + \\
 &\quad + [a_\epsilon^+(\mathbf{k}), a_\epsilon(\mathbf{k}')](\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_i (\mathbf{k}' \times \boldsymbol{\epsilon}')_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_\beta} \} = \\
 &= \frac{-i\hbar}{\epsilon_0 c^2 (2\pi)^3} \int d^3k \sum_\epsilon (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_i (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_j e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)} \\
 &= \frac{-i\hbar}{\epsilon_0 c^2 (2\pi)^3} \int d^3k \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j}{\mathbf{k}^2} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)} \tag{17}
 \end{aligned}$$

En utilisant la fonction delta transverse (voir appendice et complément A₁ de « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique »), nous pouvons réécrire (17) sous la forme :

$$[(\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_i, B_j(\mathbf{r}_\beta)] = -\frac{i\hbar}{\epsilon_0 c^2} \delta_{ij}^\perp (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \tag{18}$$

Finalement, la formule (15) donnant l'hamiltonien H'_2 se simplifie à l'aide de (16) et (18) :

$$\begin{aligned}
 H'_2 &= - \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i, j} \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{2\epsilon_0 c^2} \delta_{ij}^\perp (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) (\mathbf{S}_\alpha)_i (\mathbf{S}_\beta)_j + \\
 &\quad + \sum_\alpha \frac{\gamma_\alpha^2}{2} [\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha)].[\mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha) \times \mathbf{S}_\alpha] \tag{19}
 \end{aligned}$$

Etudions d'abord, dans le premier terme de H'_2 , la contribution des termes correspondant à des particules différentes ($\alpha \neq \beta$). En utilisant la formule (34) de l'appendice, nous pouvons réécrire le terme relatif à la paire α, β :

$$\begin{aligned}
 H'_2(\alpha, \beta) &= -\frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta (\mathbf{S}_\alpha)_i (\mathbf{S}_\beta)_j}{\epsilon_0 c^2} \delta_{ij}^\perp (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \\
 &= -\frac{2}{3} \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{S}_\beta \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) + \\
 &\quad + \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{4\pi \epsilon_0 c^2} \left[\frac{\mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{S}_\beta}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|^3} - 3 \frac{[\mathbf{S}_\alpha \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)][\mathbf{S}_\beta \cdot (\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta)]}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|^5} \right] \tag{20}
 \end{aligned}$$

On reconnaît deux contributions dans $H'_2(\alpha, \beta)$: la première est l'interaction de contact de Fermi, la seconde est l'interaction dipôle-dipôle.

Le premier terme de (19), dans le cas $\alpha = \beta$, donne une contribution $\epsilon_{\mathbf{S}_\alpha}$ à l'énergie propre des moments magnétiques

$$\epsilon_{\mathbf{S}_\alpha} = -\frac{\gamma_\alpha^2}{2\epsilon_0 c^2} \sum_{i, j} \delta_{ij}^\perp(\mathbf{0}) (\mathbf{S}_\alpha)_i (\mathbf{S}_\alpha)_j \tag{21}$$

En introduisant une coupure $|\mathbf{k}| \leq k_c$, nous obtenons pour $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{0})$

$$\delta_{ij}^\perp(\mathbf{0}) = \int_{|\mathbf{k}| < k_c} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j}{\mathbf{k}^2} \right) = \frac{k_c^3}{9\pi^2} \delta_{ij} \tag{22}$$

ce qui donne pour ϵ_{S_α}

$$\epsilon_{S_\alpha} = - \frac{\gamma_\alpha^2 k_c^3}{18\pi^2 \epsilon_0 c^2} S_\alpha^2 \quad (23)$$

L'interaction des spins avec le champ transverse est donnée par le dernier terme de (19) qui est quadratique en fonction des opérateurs d'annihilation et de création $a_e(\mathbf{k})$ et $a_e^+(\mathbf{k})$. Notons que l'opérateur $\mathbf{B}(\mathbf{r}_\alpha)$, qui apparaît dans cette formule, ne représente plus dans le nouveau point de vue le champ magnétique total, mais plutôt la différence entre le champ magnétique total et le champ magnétique produit par les moments magnétiques (discussion analogue à celle du paragraphe 2-a du complément B_{II}).

d) Dans la transformation unitaire, H_S devient :

$$H'_S = e^{iF/\hbar} H_S e^{-iF/\hbar} = \sum_\alpha -\gamma_\alpha \mathbf{B}_0 \cdot (e^{iF/\hbar} \mathbf{S}_\alpha e^{-iF/\hbar}) \quad (24)$$

Si nous ne gardons que les deux premiers termes de (4), nous obtenons pour la composante $(S_\alpha)_i$

$$e^{iF/\hbar} (S_\alpha)_i e^{-iF/\hbar} = (S_\alpha)_i + \frac{i}{\hbar} [F, (S_\alpha)_i] \quad (25)$$

expression qui peut être transformée à l'aide de (6) et (16)

$$\begin{aligned} [F, (S_\alpha)_i] &= \sum_\beta \sum_j \gamma_\beta (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\beta))_j [(S_\beta)_j, (S_\alpha)_i] \\ &= \sum_{j,k} \gamma_\alpha (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha))_j i\hbar \epsilon_{ijk} (S_\alpha)_k \end{aligned} \quad (26)$$

En utilisant (24) et (26), nous obtenons ainsi pour H'_S :

$$H'_S = - \sum_\alpha \gamma_\alpha \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{B}_0 + \sum_\alpha \gamma_\alpha^2 [\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha)] \cdot (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{S}_\alpha) \quad (27)$$

Le dernier terme de (27) est un nouvel hamiltonien d'interaction spins-champ transverse, linéaire en α et α^+ (terme à un photon) :

$$H'_{I'} = \sum_\alpha \gamma_\alpha^2 [\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}_\alpha)] \cdot (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{S}_\alpha) \quad (28)$$

Il est manifestement lié à la précession du moment magnétique autour du champ statique \mathbf{B}_0 . Le spin ne peut rayonner et donc émettre des photons que parce qu'il est en mouvement de précession autour de \mathbf{B}_0 .

Remarque

L'hamiltonien d'interaction du point de vue habituel H_I diffère de l'hamiltonien $H'_{I'}$ trouvé après application de la transformation unitaire. Bien entendu, toutes les prévisions physiques doivent être identiques dans les deux points de vue. Si nous considérons par exemple un spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique \mathbf{B}_0 aligné le long de l'axe Oz , ce spin peut émettre un photon dans un mode $k\epsilon$ du champ pour lequel $ck = -\gamma_\alpha B_0$. Lorsque cette condition de résonance est vérifiée, il est facile de démontrer l'égalité suivante :

$$\langle +\frac{1}{2}; 0 | H'_{I'} | -\frac{1}{2}; k\epsilon \rangle = \langle +\frac{1}{2}; 0 | H_I | -\frac{1}{2}; k\epsilon \rangle \quad (29)$$

(avec $|k\epsilon\rangle = a_e^+(\mathbf{k})|0\rangle$). L'égalité (29) assure que les probabilités de transition (absorption ou émission de photons) sont les mêmes dans les deux points de vue sur la couche d'énergie.

12. MODIFICATION DU MOMENT MAGNÉTIQUE D'UN ATOME DUE À L'INTERACTION AVEC LES FLUCTUATIONS DU CHAMP MAGNÉTIQUE DU VIDE

Soit un atome paramagnétique dans son état fondamental $|a\rangle$. On considérera cet atome comme une particule neutre de moment magnétique $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$ où \mathbf{S} est le spin de la particule et γ le rapport gyromagnétique qui peut être écrit sous la forme $\gamma = g_a q/2m$, où q et m sont la charge et la masse de l'électron et g_a le facteur de Landé de l'état a . Cet atome est placé dans un champ magnétique \mathbf{B}_0 statique parallèle à $0z$. L'évolution libre du moment magnétique couplé à \mathbf{B}_0 est un mouvement de précession de Larmor, de fréquence $\omega_L = -\gamma B_0$. Le but de cet exercice est de montrer que cette fréquence est très légèrement modifiée par suite de l'interaction du moment magnétique atomique avec le champ magnétique des fluctuations du vide. On utilisera pour cela la même transformation unitaire que celle introduite dans l'exercice 11.

Pour étudier l'effet du couplage avec le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ du rayonnement, on prend l'hamiltonien modèle (*) suivant :

$$H = H_R + H_S + H_I \quad (1)$$

où H_R est l'hamiltonien propre du rayonnement, $H_S = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_0$ décrit l'interaction du moment magnétique avec le champ statique et $H_I = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$ l'interaction avec le champ de rayonnement.

a) Calculer à l'ordre 3 en q l'opérateur H'_S transformé de H_S par la transformation unitaire $T = \exp(iF/\hbar)$ où $F = \gamma(\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r})).\mathbf{S}$; les champs $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{Z}(\mathbf{r})$ sont donnés par les formules (3) et (7) de l'exercice 11. On pourra utiliser la formule (4) de cet exercice avec $B = H_S$, $A = F/\hbar$ et calculer les trois premiers termes du développement.

b) Calculer la valeur moyenne de H'_S dans l'état $|m_s; 0\rangle$ ($m_s\hbar$ étant la valeur propre de S_z et $|0\rangle$ le vide de photons). Montrer qu'on obtient ainsi une correction $\delta\omega_L$ à la fréquence de Larmor ω_L . Exprimer

(*) Cet hamiltonien n'est pas suffisant pour prédire quantitativement la modification du moment magnétique d'un électron libre. On peut en effet montrer qu'il existe des termes d'origine relativiste dans l'interaction électron-rayonnement, dont l'effet, pour des fréquences du champ grandes devant les fréquences atomiques, est du même ordre de grandeur que celui des termes conservés dans cet hamiltonien modèle. Ils ne changent pas cependant qualitativement les conclusions déduites de (1). On trouvera une approche plus complète et plus rigoureuse de ce problème dans les références suivantes :

- P. Avan, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et C. Fabre, J. Physique **37**, 993 (1976)
- J. Dupont-Roc, C. Fabre et C. Cohen-Tannoudji, J. Phys. **B11**, 563 (1978)
- J. Dupont-Roc et C. Cohen-Tannoudji dans Tendances Actuelles en Physique Atomique, New Trends in Atomic Physics, Les Houches XXXVIII, p. 157, G. Grynberg et R. Stora eds, Elsevier (1984).

$\delta\omega_L/\omega_L$ en fonction de $x_M = \hbar\omega_M/mc^2$ (où $\omega_M = ck_M$ est la fréquence de coupure du développement en modes) et de la constante de structure fine $\alpha = q^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$.

c) Quelle est l'origine physique de $\delta\omega_L$? Peut-on interpréter son signe?

d) Dans le même champ magnétique B_0 , une particule de charge q et de masse m effectue un mouvement cyclotron de fréquence $\omega_c = -qB_0/m$. L'interaction de cette particule avec le champ transverse est responsable d'une variation de masse δm et donc d'une variation $\delta\omega_c$ de la fréquence cyclotron avec

$$\frac{\delta\omega_c}{\omega_c} = -\frac{\delta m}{m} \quad (2)$$

δm étant égal à $q^2k_M/3\epsilon_0\pi^2c^2$ (voir exercice 10). Comparer $\delta\omega_L/\omega_L$ à $\delta\omega_c/\omega_c$.

Si on définit le facteur de Landé corrigé g'_a par la relation

$$\frac{g'_a}{2} = \frac{\omega'_L}{\omega'_c} \quad (3)$$

avec $\omega'_L = \omega_L + \delta\omega_L$ et $\omega'_c = \omega_c + \delta\omega_c$, quel est le signe de la correction $\delta g_a = g'_a - g_a$? Quelle est son origine?

Solution

a) Pour connaître H'_S

$$H'_S = e^{iF/\hbar} H_S e^{-iF/\hbar} = -\gamma B_0 e^{iF/\hbar} S_z e^{-iF/\hbar} \quad (4)$$

à l'ordre 3 en γ , il faut calculer la transformée de S_z à l'ordre 2. Les termes d'ordres 0 et 1 ont été calculés dans l'exercice 11 (formules (25) et (26)). Nous calculons maintenant le terme d'ordre 2

$$S'^{(2)}_z = \frac{1}{2} \left[\frac{iF}{\hbar}, \left[\frac{iF}{\hbar}, S_z \right] \right] \quad (5)$$

Partant de la relation (26) de l'exercice 11, nous obtenons

$$S'^{(2)}_z = \frac{i\gamma^2}{2\hbar} \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} [(\nabla \times \mathbf{Z(r)})_i S_i, (\nabla \times \mathbf{Z(r)})_j S_k] \quad (6)$$

Les composantes du champ $\nabla \times \mathbf{Z(r)}$ commutent entre elles. Transformons (6) en utilisant la relation de commutation entre les composantes de \mathbf{S} (voir formule (16) de

l'exercice 11)

$$\begin{aligned}
 S_i^{(2)} &= -\frac{\gamma^2}{2} \sum_{i,j,k,l} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ikl} S_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j \\
 &= -\frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq z} \sum_{i,l} (\delta_{il} \delta_{ji} - \delta_{il} \delta_{jl}) S_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j \\
 &= -\frac{\gamma^2}{2} \sum_{j \neq z} [S_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j - S_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i]
 \end{aligned} \quad (7)$$

On obtient finalement H'_S en regroupant $-\gamma B_0 S_i^{(2)}$ avec les termes d'ordres 0 et 1 précédemment calculés

$$\begin{aligned}
 H'_S &= -\gamma B_0 S_i + \gamma^2 (\mathbf{B}_0 \times \mathbf{S}) \cdot (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r})) + \\
 &\quad + \frac{\gamma^3}{2} B_0 \sum_{j \neq z} [S_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j - S_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i]
 \end{aligned} \quad (8)$$

b) Calculons la valeur moyenne des termes d'ordre 0 et 1 de H'_S dans l'état $|m_s;0\rangle$. On trouve $-m_s \hbar \gamma B_0$ pour le terme d'ordre 0 et 0 pour le terme d'ordre 1 puisque ce terme est linéaire en $a_\epsilon(\mathbf{k})$ et $a_\epsilon^+(\mathbf{k})$ dont la valeur moyenne dans le vide est nulle. Pour trouver la valeur moyenne du terme suivant, calculons auparavant

$$\begin{aligned}
 \langle 0 | (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j | 0 \rangle &= \\
 &= \int d^3 k' d^3 k \sum_{\epsilon, \epsilon'} \frac{\hbar}{2 \epsilon_0 c^2 (2\pi)^3 \sqrt{\omega \omega'}} \times \\
 &\quad \times (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_i (\mathbf{k}' \times \boldsymbol{\epsilon}')_j \langle 0 | a_\epsilon(\mathbf{k}) a_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}') | 0 \rangle e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}
 \end{aligned} \quad (9)$$

Les autres combinaisons d'opérateurs d'annihilation et de création ont une valeur moyenne nulle dans le vide. En utilisant la relation de commutation

$$[a_\epsilon(\mathbf{k}), a_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}')]=\delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (10)$$

et la formule (33) de l'appendice, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \langle 0 | (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_i (\nabla \times \mathbf{Z}(\mathbf{r}))_j | 0 \rangle &= \int d^3 k \sum_{\epsilon} \frac{\hbar}{2 \epsilon_0 c^2 \omega (2\pi)^3} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_i (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon})_j = \\
 &= \int d^3 k \frac{\hbar}{2 \epsilon_0 c^2 \omega (2\pi)^3} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = \frac{\hbar k_M^2}{12 \pi^2 \epsilon_0 c^3} \delta_{ij}
 \end{aligned} \quad (11)$$

En définitive, la valeur moyenne dans l'état $|m_s;0\rangle$ de l'opérateur H'_S écrit en (8) est donnée par :

$$\langle m_s;0 | H'_S | m_s;0 \rangle = -m_s \hbar \gamma B_0 \left(1 - \gamma^2 \frac{\hbar k_M^2}{12 \pi^2 \epsilon_0 c^3} \right) \quad (12)$$

On trouve ainsi une correction $\delta \omega_L$ à la fréquence de Larmor $\omega_L = -\gamma B_0$ égale à :

$$\delta \omega_L = -\omega_L \frac{g_a^2 q^2}{4m^2} \frac{\hbar k_M^2}{12 \pi^2 \epsilon_0 c^3} \quad (13)$$

Exprimons finalement $\delta \omega_L / \omega_L$ en fonction de g_a , x_M et α . Il vient

$$\frac{\delta \omega_L}{\omega_L} = - \frac{g_a^2}{4} \frac{\alpha}{3\pi} x_M^2 \quad (14)$$

c) Le moment magnétique précesse (en gardant un module constant) dans le champ total, champ statique $B_0 +$ champ $B(r)$ du vide. Les fluctuations du vide de fréquence ω élevée (devant ω_L) font osciller angulairement le moment magnétique à la fréquence ω . Pour le couplage avec le champ statique B_0 , seule compte la moyenne temporelle du moment magnétique qui a clairement un module plus petit que le moment magnétique instantané. On s'attend donc à ce que l'oscillation angulaire rapide du moment magnétique dans les fluctuations du vide diminue le moment magnétique effectif de l'atome et produise donc une correction $\delta \omega_L / \omega_L$ négative en accord avec la formule (14).

d) Exprimons la variation $\delta \omega_c / \omega_c$ de la fréquence cyclotron en fonction de x_M et α . En utilisant la relation (2), nous trouvons

$$\frac{\delta \omega_c}{\omega_c} = - 4 \frac{\alpha}{3\pi} x_M \quad (15)$$

Nous voyons donc que $\delta \omega_c / \omega_c$ est linéaire en x_M , alors que $\delta \omega_L / \omega_L$ est quadratique (voir (14)). Pour les modes basse fréquence ($x_M \ll 1$), décrits correctement dans cette approche théorique, la modification de la fréquence cyclotron est donc plus importante que la modification de la fréquence de Larmor. Un tel résultat n'est pas surprenant. Il exprime que, dans le domaine non relativiste, les interactions magnétiques, responsables de $\delta \omega_L / \omega_L$, sont moins intenses que les interactions électriques, responsables de $\delta \omega_c / \omega_c$.

Si l'on définit g'_a par la relation (3), le terme correctif prépondérant provient de la correction linéaire en x_M de $\delta \omega_c / \omega_c$. Par suite du signe de $\delta \omega_c / \omega_c$ (15), ce terme conduit à une valeur de g'_a supérieure à g_a . Comme la fréquence cyclotron ω_c diminue plus que la fréquence de Larmor ω_L , le rapport $2\omega_L / \omega_c$ augmente. Donc

$$\delta g_a > 0 \quad (16)$$

13. EXCITATION D'UN ATOME PAR UN PAQUET D'ONDES : ABSORPTION EN RAIE LARGE ET EN RAIE ÉTROITE

On considère un atome dans son niveau fondamental a interagissant avec un photon dont l'état est décrit par le paquet d'ondes $|\psi_R\rangle$. Le but de cet exercice est de calculer la probabilité pour que l'atome passe dans un niveau excité b sous l'effet d'une telle excitation et de montrer que l'évolution temporelle de cette probabilité est très différente suivant que la largeur spectrale du champ incident est grande ou petite devant la largeur naturelle Γ_b du niveau excité.

a) Montrer que l'élément de matrice $\langle b;0|G(E+i\eta)|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ de la résolvante (où η est un infiniment petit positif) peut être pris, à une très bonne approximation, égal à

$$\langle b;0|G(E+i\eta)|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle = \frac{\langle b;0|H_{I1}|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle}{(E - \tilde{E}_b + i\hbar\frac{\Gamma_b}{2})(E + i\eta - \tilde{E}_a - \hbar\omega)} \quad (1)$$

où \tilde{E}_a et \tilde{E}_b sont les énergies des niveaux a et b incluant les déplacements radiatifs ($\tilde{E}_i = E_i + \hbar\Delta_i$ pour $i = a,b$).

b) En déduire l'amplitude de probabilité $\langle b;0|U(t)|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ de trouver le système dans l'état $|b;0\rangle$ à l'instant t sachant qu'il est dans l'état $|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ à l'instant initial. On posera $\hbar\tilde{\omega}_{ba} = (\tilde{E}_b - \tilde{E}_a)$.

c) On suppose maintenant que l'état initial du champ $|\psi_R\rangle$ est un paquet d'ondes à un photon de la forme

$$|\psi_R\rangle = \int dk g(k - k_1) |\mathbf{k}\epsilon\rangle \quad (2)$$

où \mathbf{k}_1 est le vecteur d'onde moyen associé à la distribution des vecteurs d'ondes de $|\psi_R\rangle$ et où la sommation porte sur des états de même polarisation ϵ et de même direction de propagation $\mathbf{k} = \mathbf{k}/k$. Donner l'expression de l'amplitude de transition $\langle b;0|U(t)|a;\psi_R\rangle = U_{ba}(t)$. On négligera la dépendance en k des éléments de matrice $\langle b;0|H_{I1}|a;\mathbf{k}\epsilon\rangle$ qui pourront ainsi être remplacés par un élément de matrice unique $\langle b;0|H_{I1}|a;\mathbf{k}_1\epsilon\rangle$.

Dans toute la suite, on supposera que $\omega_1 = ck_1$ coïncide avec la fréquence $\tilde{\omega}_{ba}$ de la transition. En d'autres termes, le paquet d'ondes incident a une fréquence centrale résonnante avec celle de la transition atomique.

d) Si la courbe donnant $|g(k)|^2$ en fonction de k a une largeur Δk petite devant la valeur moyenne k_1 de k , on peut montrer que le carré du module de la transformée de Fourier de $g(k)$ est, à un facteur

près, l'intensité du champ $\langle E^{(-)}E^{(+)} \rangle$ à l'endroit où se trouve l'atome (*).

Soit $f(t)$ la transformée de Fourier de $g(k)$

$$f(t) = \int d\omega g(k) e^{-i\omega t} \quad (3)$$

L'allure de $f(t)$ est donnée sur la figure 1. Nous supposons que $f(t)$ est maximum pour $t = t_0$ et a une largeur à mi-hauteur égale à Δt . L'origine des temps est choisie de sorte que t_0 soit très grand devant Δt et aussi devant Γ_b^{-1} . L'instant initial $t = 0$ est donc choisi bien antérieur à l'instant où le paquet d'ondes incident arrive au voisinage de l'atome

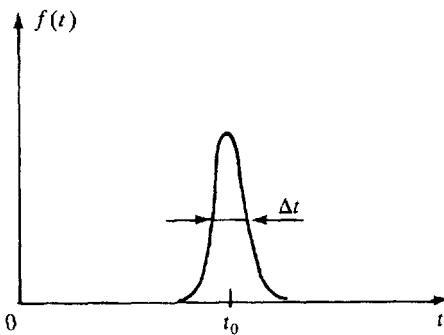


Figure 1. Allure de la fonction $f(t)$.

Montrer que, compte tenu de ces hypothèses, l'amplitude de transition $U_{ba}(t)$ calculée en c) est proportionnelle au produit de convolution de $f(t)$ par la transformée de Fourier de $-[\omega + i(\Gamma_b/2)]^{-1}$.

e) On considère d'abord la situation où $|g(k)\rangle$ est une fonction très étroite en k , de largeur Δk beaucoup plus petite que Γ_b (excitation en raie étroite). Montrer que la probabilité de trouver l'atome dans le niveau b suit alors adiabatiquement l'évolution temporelle de $|f(t)|^2$, c'est-à-dire celle de l'intensité incidente.

f) On considère à présent le cas d'une excitation quasi-percussionnelle où $\Delta t \ll \Gamma_b^{-1}$. Montrer que la probabilité de trouver l'atome dans le niveau b est alors représentée par une courbe dont le temps de montée est de l'ordre de Δt et dont le temps de décroissance est égal à Γ_b^{-1} .

(*) Voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique », chapitre III, § C-2-c.

Solution

a) Appelons \mathcal{E}_0 le sous-espace tendu par $|b;0\rangle$ et P le projecteur sur ce sous-espace. La relation (B.31) du chapitre III donne

$$\begin{aligned} \langle b;0 | G(z) | a;ke \rangle &= \langle b;0 | G(z) | b;0 \rangle \times \\ &\times \langle b;0 | V \frac{1}{z - Q H_0 Q - Q V Q} | a;ke \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

Le même type de raisonnement que celui conduisant de la relation (C.26) à la relation (C.29) du chapitre III permet alors d'établir l'équation (1).

b) L'amplitude de transition $\langle b;0 | U(t) | a;ke \rangle$ se déduit de (1) par l'intégrale de contour (A.22) du chapitre III. L'intégration par la méthode des résidus donne alors

$$\begin{aligned} \langle b;0 | U(t) | a;ke \rangle &= \frac{\langle b;0 | H_{II} | a;ke \rangle}{(\tilde{E}_b - \tilde{E}_a - \hbar\omega - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2})} \times \\ &\times [e^{-i\tilde{E}_b t/\hbar} e^{-\Gamma_b t/2} - e^{-i(\tilde{E}_a + \hbar\omega)t/\hbar}] \end{aligned} \quad (5)$$

c) Comme $|\psi_R\rangle$ est une superposition linéaire d'états $|ke\rangle$, on trouve immédiatement :

$$\langle b;0 | U(t) | a; \psi_R \rangle = \int dk g(k - k_1) \langle b;0 | U(t) | a;ke \rangle \quad (6)$$

En utilisant (5), ainsi que l'hypothèse sur $\langle b;0 | H_{II} | a;ke \rangle$, nous obtenons alors

$$\begin{aligned} U_{ba}(t) &= \langle b;0 | H_{II} | a;k_1 e \rangle \times \\ &\times \int dk g(k - k_1) \frac{[e^{-i\tilde{E}_b t/\hbar} e^{-\Gamma_b t/2} - e^{-i(\tilde{E}_a + \hbar\omega)t/\hbar}]}{\hbar(\tilde{\omega}_{ba} - \omega - i\frac{\Gamma_b}{2})} \end{aligned} \quad (7.a)$$

c'est-à-dire encore, en effectuant le changement de variables $k' = k - k_1$ et en utilisant le fait que $\omega_1 = ck_1 = \tilde{\omega}_{ba}$

$$\begin{aligned} U_{ba}(t) &= \frac{1}{\hbar} e^{-i\tilde{E}_b t/\hbar} \langle b;0 | H_{II} | a;k_1 e \rangle \times \\ &\times \int dk' g(k') \frac{[e^{-\Gamma_b t'/2} - e^{-i\omega' t'}]}{-(\omega' + i\frac{\Gamma_b}{2})} \end{aligned} \quad (7.b)$$

d) Soit $h(t)$ la transformée de Fourier de $-[\omega + i(\Gamma_b/2)]^{-1}$

$$h(t) = \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{-\omega - i\frac{\Gamma_b}{2}} = 2\pi i \theta(t) \exp(-\Gamma_b t/2) \quad (8)$$

où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside.

Dans l'intégrale sur k' de (7.b) apparaît le produit de $g(k')$ et $-[\omega' + i(\Gamma_b/2)]^{-1}$, qui par transformée de Fourier donne le produit de convolution fob de $f(t')$ et $h(t')$ que l'on notera C

$$\begin{aligned} C(t) &= fob(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t') h(t - t') dt' \\ &= i \int_{-\infty}^{+\infty} f(t') e^{-\frac{\Gamma_b}{2}(t-t')} \theta(t - t') dt' \end{aligned} \quad (9)$$

Le premier terme, $\exp(-\Gamma_b t/2)$, du crochet de (7.b) ne dépend pas de k' . Il donne donc naissance à une contribution proportionnelle à $C(0)$:

$$\frac{1}{\hbar c} \langle b;0 | H_{II} | a; k_1 \epsilon \rangle e^{-iE_b t/\hbar} e^{-\Gamma_b t/2} C(0) \quad (10)$$

D'après les hypothèses faites sur $f(t)$ (voir Fig. 1), $f(t')$ et $\theta(0 - t') = \theta(-t')$ ne se recouvrent pas, de sorte que l'équation (9) donne un résultat nul pour $C(0)$. Il ne reste donc que la contribution du second terme du crochet de (7.b) qui conduit pour $U_{ba}(t)$ au résultat

$$U_{ba}(t) = -\frac{1}{\hbar c} \langle b;0 | H_{II} | a; k_1 \epsilon \rangle e^{-iE_b t/\hbar} C(t) \quad (11)$$

e) Le produit de convolution $f * h$ s'obtient en faisant l'intégrale sur t' des deux fonctions $f(t')$ et $h(t - t')$ représentées sur la figure 2.

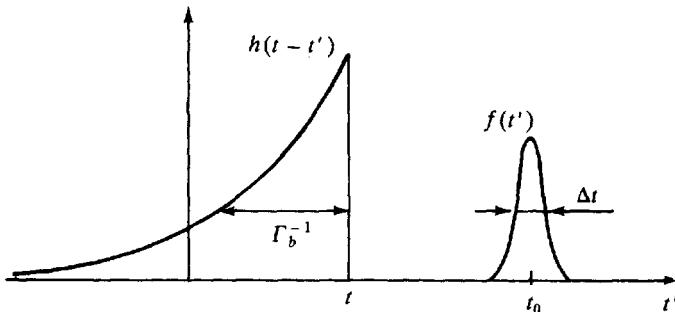


Figure 2. Allure des fonctions $h(t - t')$ et $f(t')$.

Dans un produit de convolution de deux fonctions de largeurs très différentes, c'est la fonction la plus large qui donne l'allure de la variation temporelle du produit de convolution.

Si la largeur Δk de $g(k)$ est très petite devant Γ_b (excitation en raie étroite), la largeur $1/\Delta k$ de $f(t')$ est beaucoup plus grande que celle, Γ_b^{-1} , de $h(t - t')$. Le produit de convolution $C(t)$ ressemble alors beaucoup à $f(t)$ et la probabilité d'excitation $|U_{ba}(t)|^2$ varie comme l'intensité $|f(t)|^2$ du champ incident à l'emplacement où se trouve l'atome.

f) Si, au contraire, $\Delta k \gg \Gamma_b$ (excitation en raie large), c'est $f(t')$ qui est beaucoup plus étroite que $h(t - t')$ et $C(t)$ ressemble alors beaucoup à $h(t - t_0)$, le flanc de montée en $t = t_0$ ayant une largeur de l'ordre de Δt (Fig. 3).

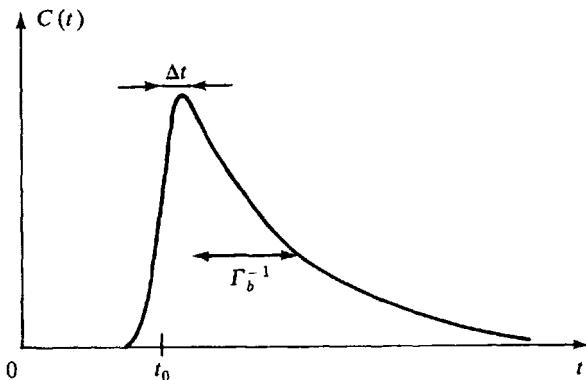


Figure 3. Allure de $C(t)$ dans le cas où $\Delta t \ll \Gamma_b^{-1}$.

$|U_{ba}(t)|^2$ croît donc sur un intervalle de temps de l'ordre de Δt puis décroît ensuite avec une constante de temps égale à Γ_b^{-1} . Dans ce cas, la phase de préparation du système dans l'état excité, qui dure un temps Δt , est nettement différenciée de la phase de désintégration qui dure un temps Γ_b^{-1} .

**14. ÉMISSION SPONTANÉE D'UN ENSEMBLE DE DEUX ATOMES PROCHES.
ÉTATS SUPERRADIANTS ET ÉTATS SUBRADIANTS (*)**

On considère un ensemble de deux atomes identiques. Le premier, localisé en \mathbf{R}_1 , est schématisé par un électron 1, de position \mathbf{r}_1 et d'impulsion \mathbf{p}_1 , évoluant dans un potentiel central. On appelle a_1 le niveau fondamental de cet atome et b_1 le premier niveau excité. Pour le second atome, les grandeurs correspondantes sont notées \mathbf{R}_2 , \mathbf{r}_2 et \mathbf{p}_2 et les états a_2 et b_2 . La distance $R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$ entre les deux atomes est supposée grande devant l'extension spatiale a_0 de chaque atome, mais petite devant la longueur d'onde λ_0 de la transition $a_1 \leftrightarrow b_1$ (ou $a_2 \leftrightarrow b_2$). On négligera l'interaction électrostatique entre les dipôles des deux atomes (forces de Van der Waals). En revanche, le couplage de chaque atome avec le potentiel vecteur \mathbf{A} du champ de rayonnement est pris en compte. Le but de l'exercice est d'étudier l'émission spontanée d'un tel système. De manière plus précise, il s'agit de montrer qu'il existe des états d'excitation du système des deux atomes qui émettent un photon plus rapidement qu'un atome isolé (états superradiants), et d'autres états d'excitation qui n'émettent pas de photon du tout (états subradiants).

Comme $a_0 \ll R \ll \lambda_0$, il est possible de faire l'approximation des grandes longueurs d'onde et de remplacer, dans l'hamiltonien d'interaction H_I , $\mathbf{A}(\mathbf{r}_1)$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r}_2)$ par $\mathbf{A}(0)$ en choisissant l'origine des coordonnées au voisinage de \mathbf{R}_1 et de \mathbf{R}_2 . Ceci donne pour H_I l'expression :

$$H_{II} = \sum_{i=1,2} -\frac{q}{m} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}(0) \quad (1)$$

On appelle $|\varphi_1\rangle = |a_1, b_2; 0\rangle$ l'état où l'atome 1 est dans l'état a , l'atome 2 dans l'état b en présence de 0 photon et $|\varphi_2\rangle = |b_1, a_2; 0\rangle$ l'état où les excitations atomiques sont échangées. Les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ étant dégénérés, il suffit d'étudier la restriction de la résolvante au sous-espace \mathcal{E}_0 engendré par $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ pour déterminer l'évolution du système à l'intérieur de ce sous-espace.

a) Soit M la matrice $M = P H_0 P + P \hat{R}(E_0 + i\eta)P$, où P est le projecteur sur le sous-espace \mathcal{E}_0 . \hat{R} est la matrice déplacement calculée à l'ordre 2 en q , $E_0 = E_b + E_a$ et η est un infiniment petit positif. Exprimer les éléments de matrice diagonaux $M_{11} = \langle \varphi_1 | M | \varphi_1 \rangle$ et $M_{22} = \langle \varphi_2 | M | \varphi_2 \rangle$ en fonction de $\tilde{E}_a = E_a + \hbar\Delta_a$ et $\tilde{E}_b = E_b + \hbar\Delta_b$ où $\hbar\Delta_a$ et $\hbar\Delta_b$ sont les déplacements radiatifs des états a et b .

(*) Les états superradiants ont été introduits par R. H. Dicke, Phys. Rev. 93, 99 (1954).

b) Calculer les éléments de matrice non diagonaux $M_{12} = \langle \varphi_1 | M | \varphi_2 \rangle$ et $M_{21} = \langle \varphi_2 | M | \varphi_1 \rangle$. Montrer que le résultat obtenu peut s'écrire

$$M_{12} = M_{21} = \hbar \Delta_a + \hbar \Delta_b - i \hbar \frac{\Gamma_b}{2} \quad (2)$$

si on se limite aux seuls niveaux a et b dans le calcul des déplacements radiatifs $\hbar \Delta_a$ et $\hbar \Delta_b$. Dans la suite, on supposera que l'atome est effectivement décrit par un système à deux niveaux a et b et on utilisera le résultat (2).

c) Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice M . En déduire que si le système est dans l'état $|\varphi_s;0\rangle$ où

$$|\varphi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|a_1, b_2\rangle + |b_1, a_2\rangle] \quad (3)$$

sa durée de vie radiative est plus courte que celle d'un atome isolé (cet état est appelé superradiant).

Pourquoi appelle-t-on subradiant l'état $|\varphi_a;0\rangle$ où

$$|\varphi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|a_1, b_2\rangle - |b_1, a_2\rangle] \quad (4)$$

d) On suppose qu'à l'instant initial, le système est dans l'état $|\varphi_1\rangle$. Quelle est la probabilité de trouver l'un des deux atomes excités au bout d'un temps long devant $1/\Gamma_b$.

e) Les hamiltoniens des atomes 1 et 2 sont notés $H_p^{(1)}$ et $H_p^{(2)}$. Calculer la valeur moyenne du moment dipolaire de l'atome 1, $\langle \varphi_s | qz_1(t) | \varphi_s \rangle$, dans l'état superradiant ainsi que la fonction de corrélation libre $q^2 \langle \varphi_s | z_1(t) z_2(0) | \varphi_s \rangle$ où $qz_1(t) = \exp(i H_p^{(1)} t / \hbar) qz_1 \exp(-i H_p^{(1)} t / \hbar)$ est l'opérateur moment dipolaire dans le point de vue de Heisenberg. Que valent ces mêmes valeurs moyennes dans l'état subradiant $|\varphi_a\rangle$. Comment peut-on interpréter physiquement l'origine de la superradiance et de la subradiance ?

Solution

a) L'élément de matrice M_{11} est égal à $E_a + E_b + \dot{R}_{11}(E_0 + i\eta)$. En procédant comme dans le paragraphe C-1 du chapitre III, nous trouvons à l'ordre 2 en q_a

$$\begin{aligned} \dot{R}_{11}(E_0 + i\eta) &= \sum_c \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{e}} \frac{|\langle a_1, b_2; 0 | H_{11} | c_1, b_2; \mathbf{k}\mathbf{e} \rangle|^2}{E_a - E_c - \hbar\omega + i\eta} \\ &\quad + \sum_c \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{e}} \frac{|\langle a_1, b_2; 0 | H_{11} | a_1, c_2; \mathbf{k}\mathbf{e} \rangle|^2}{E_b - E_c - \hbar\omega + i\eta} \end{aligned} \quad (5)$$

Dans la première somme, l'atome 2 reste spectateur alors que c'est l'atome 1 qui est spectateur dans la seconde somme. Nous pouvons donc écrire

$$\hat{R}_{11}(E_0 + i\eta) = \hat{R}_{aa}(E_a + i\eta) + \hat{R}_{bb}(E_b + i\eta) \quad (6)$$

où $\hat{R}_{aa}(E_a + i\eta)$ et $\hat{R}_{bb}(E_b + i\eta)$ sont identiques aux quantités calculées au paragraphe C-1 du chapitre III pour un atome isolé. Il vient donc :

$$\hat{R}_{11}(E_0 + i\eta) = \hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \quad (7)$$

(le niveau fondamental étant stable, il n'y a pas de terme imaginaire associé à $\hbar\Delta_a$). Il s'ensuit que

$$M_{11} = \tilde{E}_a + \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \quad (8)$$

Un calcul identique montre que $M_{22} = M_{11}$.

b) Considérons à présent $M_{12} = R_{12}(E_0 + i\eta)$

$$\hat{R}_{12}(E_0 + i\eta) = \sum_{c,d} \sum_{\mathbf{k},\epsilon} \frac{\langle a_1, b_2; 0 | H_{11} | c_1, d_2; \mathbf{k}\epsilon \rangle \langle c_1, d_2; \mathbf{k}\epsilon | H_{11} | b_1, a_2; 0 \rangle}{E_a + E_b - E_c - E_d - \hbar\omega + i\eta} \quad (9)$$

Comme H_{11} ne peut modifier que l'état d'un seul atome, il apparaît clairement que les seuls états intermédiaires susceptibles de donner un résultat non nul dans (9) sont $|b_1, b_2; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ et $|a_1, a_2; \mathbf{k}\epsilon\rangle$ de sorte que

$$\hat{R}_{12}(E_0 + i\eta) = \sum_{\mathbf{k},\epsilon} \left[\frac{|\langle a_2; 0 | H_{11} | b; \mathbf{k}\epsilon \rangle|^2}{E_a - E_b - \hbar\omega + i\eta} + \frac{|\langle b; 0 | H_{11} | a; \mathbf{k}\epsilon \rangle|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega + i\eta} \right] \quad (10)$$

Dans l'hypothèse où on se limite à un atome à deux niveaux a et b , les sommes de la formule (10) sont identiques à celles donnant $R_{aa}(E_a + i\eta)$ et $R_{bb}(E_b + i\eta)$, ce qui démontre la formule (2) de l'énoncé.

c) L'hamiltonien effectif dans le sous-espace \mathcal{E}_0 est représenté par la matrice M

$$M = \begin{pmatrix} \tilde{E}_a + \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} & \hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \\ \hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} & \tilde{E}_a + \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \end{pmatrix} \quad (11)$$

Les vecteurs propres de la matrice M sont $|\varphi_s; 0\rangle$ et $|\varphi_a; 0\rangle$ et les valeurs propres associées sont :

$$\begin{aligned} \lambda_s &= \tilde{E}_a + \tilde{E}_b + \hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b - i\hbar \Gamma_b \\ &= E_a + E_b + 2(\hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b) - i\hbar \Gamma_b \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \lambda_a &= \tilde{E}_a + \tilde{E}_b - i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} - (\hbar\Delta_a + \hbar\Delta_b) + i\hbar \frac{\Gamma_b}{2} \\ &= E_a + E_b \end{aligned} \quad (13)$$

On en déduit que l'état $|\varphi_s\rangle$ a une durée de vie radiative deux fois plus courte que celle d'un atome excité isolé. C'est pourquoi cet état est appelé superradiant. En revanche,

l'état $|\varphi_a\rangle$ est stable et est appelé pour cette raison subradiant. Il est facile d'ailleurs de vérifier que $\langle a_1, a_2; \text{ke} | H_{11} | \varphi_a; 0 \rangle = 0$, ce qui montre que l'état $|\varphi_a\rangle$ n'est pas couplé au continuum à un photon et ne peut donc pas se désintégrer par émission spontanée.

d) Si le système est à l'instant initial dans l'état

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_s; 0\rangle + |\varphi_a; 0\rangle] \quad (14)$$

la projection du vecteur d'état sur \mathcal{E}_0 est, à un instant ultérieur, égale à :

$$\begin{aligned} P |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(E_a + E_b)t/\hbar} \times \\ &\times [e^{-2i(\Delta_a + \Delta_b)t} e^{-\Gamma_b t} |\varphi_s; 0\rangle + |\varphi_a; 0\rangle] \end{aligned} \quad (15)$$

Au bout d'un temps long devant $1/\Gamma_b$, $P |\psi(t)\rangle$ coïncide, à un facteur de phase près, avec $(1/\sqrt{2}) |\varphi_a; 0\rangle$, de sorte que la probabilité de trouver l'un des deux atomes excités est égale à $\frac{1}{2}$ (la probabilité étant la même et égale à $1/4$ pour chaque atome). L'évolution de l'atome 1 est donc profondément différente selon qu'il est isolé ou proche d'un autre atome identique. Cela est dû à ce que les deux atomes 1 et 2 sont couplés entre eux de façon indirecte par le rayonnement qu'ils sont susceptibles d'émettre. Les deux états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont couplés au même continuum et il serait incorrect d'appliquer la règle d'or de Fermi à un seul de ces deux états.

c) Lorsqu'on calcule $\langle \varphi_s | qz_1(t) | \varphi_s \rangle$, on obtient en utilisant la décomposition (3) de l'état $|\varphi_s\rangle$ deux types de termes : les premiers, de la forme $\langle a_1 | qz_1(t) | b_1 \rangle \langle b_2 | a_2 \rangle$, sont nuls à cause du produit scalaire $\langle b_2 | a_2 \rangle$, les seconds de la forme $\langle a_1 | qz_1(t) | a_1 \rangle \langle b_2 | b_2 \rangle$ sont nuls parce que $\langle a_1 | qz_1(t) | a_1 \rangle$ est égal à $\langle a_1 | qz_1 | a_1 \rangle$ qui vaut 0 pour des raisons de parité.

Calculons maintenant la fonction de corrélation entre les deux dipôles. En introduisant la relation de fermeture entre $z_1(t)$ et $z_2(0)$ et en ne conservant que les termes non nuls, nous obtenons :

$$\begin{aligned} q^2 \langle \varphi_s | z_1(t) z_2(0) | \varphi_s \rangle &= \\ &= q^2 [\langle \varphi_s | z_1(t) | b_1 b_2 \rangle \langle b_1 b_2 | z_2(0) | \varphi_s \rangle + \\ &+ \langle \varphi_s | z_1(t) | a_1 a_2 \rangle \langle a_1 a_2 | z_2(0) | \varphi_s \rangle] = \\ &= q^2 [\frac{1}{2} \langle a_1 | z_1(t) | b_1 \rangle \langle b_2 | z_2(0) | a_2 \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \langle b_1 | z_1(t) | a_1 \rangle \langle a_2 | z_2(0) | b_2 \rangle] \end{aligned} \quad (16)$$

soit, en utilisant $z_1(t) = \exp[iH_p^{(1)}t/\hbar] z \exp[-iH_p^{(1)}t/\hbar]$

$$\begin{aligned} q^2 \langle \varphi_s | z_1(t) z_2(0) | \varphi_s \rangle &= |d|^2 \left(\frac{e^{-i\omega_0 t}}{2} + \frac{e^{i\omega_0 t}}{2} \right) \\ &= |d|^2 \cos \omega_0 t \end{aligned} \quad (17)$$

où $|d|^2 = q^2 |z_{ba}|^2$. Les mêmes calculs faits pour l'état $|\varphi_a\rangle$ donnent

$$\langle \varphi_a | qz_1(t) | \varphi_a \rangle = 0 \quad (18.a)$$

$$q^2 \langle \varphi_a | z_1(t) z_2(0) | \varphi_a \rangle = -|d|^2 \cos \omega_0 t \quad (18.b)$$

Aussi bien pour l'état superradiant que pour l'état subradiant, la valeur moyenne de chaque dipôle électrique est nulle. En revanche, les dipôles des deux atomes sont parfaitement corrélés. Ils oscillent en phase dans l'état superradiant et en opposition de

phase dans l'état subradian (noter la différence de signe entre (17) et (18.b) pour $t = 0$). Par conséquent, les ondes émises par les deux atomes interfèrent de façon parfaitement constructive dans l'état superradiant, ce qui a pour conséquence que le système rayonne de façon plus efficace qu'un atome isolé et qu'il a donc une durée de vie plus courte. En revanche, dans l'état subradian, l'interférence est constamment destructive, le système ne rayonne pas et sa durée de vie est infinie.

15. CASCADE RADIATIVE D'UN OSCILLATEUR HARMONIQUE

Le but de cet exercice est de calculer la distribution spectrale des photons émis dans une cascade radiative par un oscillateur harmonique excité et de montrer, sur cet exemple simple, l'importance des interférences entre amplitudes de transition correspondant à des ordres temporels différents pour l'émission des divers photons de la cascade.

Une particule de charge q et de masse m est assujettie à se déplacer le long de l'axe $0z$ et est liée à l'origine 0 par une force de rappel, $-m\omega_0^2 z$, proportionnelle à l'elongation (on négligera toute excitation du mouvement perpendiculaire à $0z$ qui est supposé correspondre à des fréquences très supérieures à la fréquence ω_0 du mouvement d'oscillation le long de $0z$). Soient b^+ et b les opérateurs de création et d'annihilation associés à un tel oscillateur harmonique à une dimension. L'hamiltonien H_A de la particule s'écrit

$$H_A = \hbar\omega_0(b^+b + \frac{1}{2}) \quad (1)$$

et a pour états propres les états $|u_n\rangle$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) de valeurs propres $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$. A l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'hamiltonien d'interaction entre l'oscillateur et le rayonnement s'écrit

$$H_I = H_{I1} + H_{I2} = -\frac{q}{m}p_z A_z(\mathbf{0}) + \frac{q^2}{2m}A_z^2(\mathbf{0}) \quad (2)$$

où

$$p_z = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}(b^+ - b) \quad (3)$$

est l'impulsion de l'oscillateur et $A_z(\mathbf{0})$ la composante sur $0z$ du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ évalué en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

a) Le système particule + rayonnement est initialement dans l'état

$$|\varphi_n\rangle = |u_n; 0\rangle \quad (4)$$

(oscillateur dans l'état $|u_n\rangle$ en présence du vide de photons). Calculer la probabilité par unité de temps Γ_n pour que le système quitte l'état $|\varphi_n\rangle$ par émission spontanée. Γ_n est appelée largeur naturelle du niveau u_n . Exprimer Γ_n en fonction de $\Gamma_1 = \Gamma$ et calculer Γ en fonction de $q, \epsilon_0, m, c, \omega_0$.

b) Donner l'expression, au second ordre en q , du déplacement radiatif $\hbar\Delta_n$ de l'état $|\varphi_n\rangle$. On ne cherchera pas à calculer explicitement Δ_n , comme cela a été fait pour Γ_n , et on supposera qu'une coupure adéquate dans la sommation sur les modes du champ permet de rendre finie la valeur de Δ_n . A partir des propriétés des éléments de matrice de H_{I1} et H_{I2} , montrer que $\Delta_n - \Delta_{n-1} = \Delta_1 - \Delta_0$. Que peut-on en déduire

pour les énergies perturbées $\tilde{E}_n = E_n + \hbar\Delta_n$ de l'oscillateur ? On posera dans la suite

$$\hbar\tilde{\omega}_0 = \hbar\omega_0 + \hbar(\Delta_1 - \Delta_0) \quad (5)$$

c) Le système est initialement dans l'état $|\varphi_2\rangle$. On se propose d'étudier l'amplitude

$$\langle u_0; \mathbf{k}_a \epsilon_a, \mathbf{k}_b \epsilon_b | U(\tau) | u_2; 0 \rangle \quad (6)$$

pour que l'oscillateur passe au bout d'un temps τ du niveau u_2 au niveau u_0 en émettant spontanément deux photons $\mathbf{k}_a \epsilon_a$ et $\mathbf{k}_b \epsilon_b$. Dans (6), $U(\tau)$ est l'opérateur d'évolution. Pour calculer (6), on évaluera au préalable l'élément de matrice correspondant de la résolvante $G(z)$

$$\langle u_0; \mathbf{k}_a \epsilon_a, \mathbf{k}_b \epsilon_b | G(z) | u_2; 0 \rangle \quad (7)$$

et on utilisera le résultat (établi dans le paragraphe C-2-b du chapitre III) d'après lequel il suffit de remplacer dans l'expression d'ordre le plus bas en q de (7) les énergies non perturbées E_n des états u_n par $\tilde{E}_n - i\hbar \frac{\Gamma_n}{2}$. En déduire la valeur de l'amplitude (6) pour $\tau \gg \Gamma^{-1}$. Montrer que cette amplitude est une somme de deux termes que l'on exprimera en fonction de $\tilde{\omega}_0$, ω_a , ω_b , Γ et des quantités μ_a et μ_b définies par

$$\langle u_0; \mathbf{k}_i \epsilon_i | H_{I1} | u_1; 0 \rangle = \mu_i \quad (i = a, b) \quad (8)$$

d) Soit $I(\omega_a, \omega_b) d\omega_a d\omega_b$ la probabilité pour que les deux photons émis $\mathbf{k}_a \epsilon_a$ et $\mathbf{k}_b \epsilon_b$ aient des fréquences comprises respectivement entre ω_a et $\omega_a + d\omega_a$ et ω_b et $\omega_b + d\omega_b$. Montrer que $I(\omega_a, \omega_b)$ se factorise sous forme d'un produit de deux fonctions de ω_a et ω_b , ayant même largeur. En déduire que les fréquences des deux photons sont indépendantes et calculer la répartition spectrale du rayonnement émis. Comparer le résultat avec celui que l'on obtiendrait si l'on négligeait les interférences entre les deux amplitudes calculées en c).

e) Pouvez-vous généraliser les résultats obtenus en c) et d) au cas où l'oscillateur part initialement du niveau $|u_3\rangle$ et émet ensuite spontanément trois photons $\mathbf{k}_a \epsilon_a, \mathbf{k}_b \epsilon_b, \mathbf{k}_c \epsilon_c$?

Solution

a) L'hamiltonien H_{I2} n'agit que sur le rayonnement et ne peut changer l'état de l'oscillateur. La probabilité par unité de temps Γ_n de quitter l'état $|\varphi_n\rangle$ ne fait donc intervenir que H_{II} , qui couple $|\varphi_n\rangle = |u_n; 0\rangle$ à $|u_{n+1}; \mathbf{k}\epsilon\rangle$. Dans l'expression de Γ_n , donnée par la règle d'or de Fermi, on peut négliger le couplage de $|\varphi_n\rangle$ avec

$|u_{n+1};\mathbf{k}\epsilon\rangle$ qui ne conserve pas l'énergie, et il vient

$$\Gamma_n = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} |\langle u_{n-1};\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_n;0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0) \quad (9)$$

Or, les équations (2), (3) et le développement de $A_z(0)$ en $a_{\mathbf{k}\epsilon}$ et $a_{\mathbf{k}\epsilon}^\dagger$ entraînent que

$$\begin{aligned} \langle u_{n-1};\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_n;0 \rangle &= -\frac{q}{m} \langle u_{n-1} | p_x | u_n \rangle \langle \mathbf{k}\epsilon | A_z(0) | 0 \rangle \\ &= i \frac{q}{m} \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} \sqrt{n} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega L^3}} \epsilon_x \end{aligned} \quad (10)$$

de sorte que

$$|\langle u_{n-1};\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_n;0 \rangle|^2 = n |\langle u_0;\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_1;0 \rangle|^2 \quad (11)$$

et par suite

$$\Gamma_n = n \Gamma_1 \quad (12)$$

Pour calculer $\Gamma_1 = \Gamma$, utilisons (9) et (10) avec $n = 1$ et remplaçons la somme discrète $\sum_{\mathbf{k}\epsilon}$ par une intégrale. Il vient

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int k^2 dk d\Omega q^2 \frac{\hbar\omega_0}{2m} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega L^3} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0) \sum_{\epsilon \perp \mathbf{k}} \epsilon_i^2 \quad (13)$$

La somme sur les polarisations donne (voir formule (54) du complément A_I)

$$\sum_{\epsilon \perp \mathbf{k}} \epsilon_i^2 = 1 - \frac{k_i^2}{k^2} \quad (14)$$

et l'intégrale sur l'angle solide conduit à

$$\int d\Omega \left(1 - \frac{k_i^2}{k^2} \right) = \frac{8\pi}{3} \quad (15)$$

de sorte qu'il vient finalement pour Γ

$$\Gamma = \frac{q^2\omega_0}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \int \omega d\omega \delta(\omega - \omega_0) = \frac{q^2\omega_0^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \quad (16)$$

Le résultat (16) coïncide en fait avec l'inverse du temps d'amortissement radiatif de l'énergie d'une particule classique de charge q oscillant à la fréquence ω_0 (*).

b) Au second ordre en q , $\hbar\Delta_n$ s'écrit

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_n &= \langle u_n;0 | H_{II} | u_n;0 \rangle + \\ &+ \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle u_{n+1};\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_n;0 \rangle|^2}{-\hbar(\omega + \omega_0)} + \\ &+ \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle u_{n-1};\mathbf{k}\epsilon | H_{II} | u_n;0 \rangle|^2}{\hbar(\omega_0 - \omega)} \end{aligned} \quad (17)$$

(*) Voir par exemple « Photons et Atomes – Introduction à l'Electrodynamique Quantique », exercice 7 du complément C_I .

Le premier terme de (17) représente l'effet de H_{I2} au premier ordre. Comme H_{I2} n'agit pas sur $|u_n\rangle$, ce terme est indépendant de n et représente un déplacement global. Les deux termes suivants représentent l'effet de l'émission et de la réabsorption virtuelles d'un photon $\mathbf{k}\epsilon$ à partir de l'état $|u_n\rangle$, l'oscillateur passant intermédiairement dans $|u_{n+1}\rangle$ ou $|u_{n-1}\rangle$. En utilisant (11) et une identité analogue qui s'écrit

$$|\langle u_{n+1}; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | u_n; 0 \rangle|^2 = (n+1) |\langle u_1; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | u_0; 0 \rangle|^2 \quad (18)$$

on obtient pour (17)

$$\begin{aligned} \hbar\Delta_n &= \langle u_0; 0 | H_{I2} | u_0; 0 \rangle + \\ &+ (n+1) \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle u_1; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | u_0; 0 \rangle|^2}{-\hbar(\omega + \omega_0)} + \\ &+ n \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}\epsilon} \frac{|\langle u_0; \mathbf{k}\epsilon | H_{I1} | u_1; 0 \rangle|^2}{\hbar(\omega_0 - \omega)} \end{aligned} \quad (19)$$

équation qui entraîne que

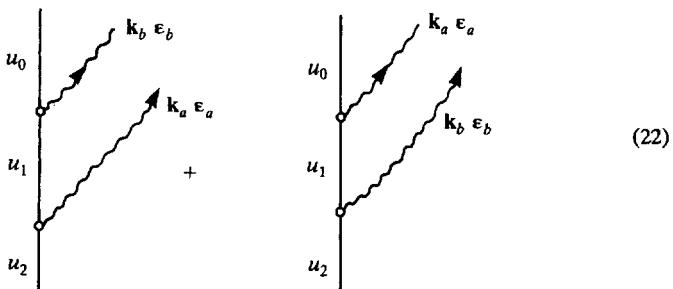
$$\hbar(\Delta_n - \Delta_{n-1}) = \hbar(\Delta_1 - \Delta_0) \quad (20)$$

Les niveaux déplacés de l'oscillateur restent donc équidistants.

c) A l'ordre le plus bas en q , l'élément de matrice (7) vaut

$$\begin{aligned} &\frac{1}{z - E_0 - \hbar\omega_a - \hbar\omega_b} \sqrt{1} \mu_b \frac{1}{z - E_1 - \hbar\omega_a} \sqrt{2} \mu_a \frac{1}{z - E_2} + \\ &+ \frac{1}{z - E_0 - \hbar\omega_a - \hbar\omega_b} \sqrt{1} \mu_a \frac{1}{z - E_1 - \hbar\omega_b} \sqrt{2} \mu_b \frac{1}{z - E_2} \end{aligned} \quad (21)$$

l'amplitude associée à (21) étant représentée par une somme de deux diagrammes



correspondant à des ordres temporels différents pour les émissions des deux photons. Pour établir (21), on a utilisé

$$\langle u_{n-1} | p_z | u_n \rangle = \sqrt{n} \langle u_0 | p_z | u_1 \rangle \quad (23)$$

et la définition (8) de μ_a et μ_b .

Comme dans le paragraphe C-2-b du chapitre III, remplaçons dans (21) E_n par $\tilde{E}_n - i\hbar \frac{\Gamma_n}{2}$ (avec $\Gamma_0 = 0$, $\Gamma_1 = \Gamma$, $\Gamma_2 = 2\Gamma$) et intégrons l'expression ainsi obtenue pour (21) le long du contour C_+ de la figure 1 du chapitre III (qui seul intervient pour

$\tau > 0$). Pour $\tau \gg \Gamma^{-1}$, seule subsiste la contribution du pôle en $\tilde{E}_0 + \hbar\omega_a + \hbar\omega_b$ et on obtient pour l'amplitude (6) le résultat

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{2}}{\hbar^2} \mu_a \mu_b \exp \{ -i(\tilde{E}_0 + \hbar\omega_a + \hbar\omega_b)t/\hbar \} \times \\ & \times \left[\frac{1}{(\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma)} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{(\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma)} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Mettions en facteur $1/(\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma)$ dans le crochet de (24) et utilisons

$$\frac{1}{\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} + \frac{1}{\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma}{(\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2})} \quad (25)$$

Il vient finalement pour l'amplitude (6)

$$\frac{\sqrt{2}}{\hbar^2} \frac{\mu_b}{\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} \frac{\mu_a}{\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2}} e^{-i(\tilde{E}_0 + \hbar\omega_a + \hbar\omega_b)t/\hbar} \quad (26)$$

d) La densité de probabilité $I(\omega_a, \omega_b)$ est proportionnelle au carré du module de (26). Elle se factorise donc sous la forme

$$I(\omega_a, \omega_b) \sim \frac{2}{\hbar^4} \frac{|\mu_b|^2}{(\omega_b - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \times \frac{|\mu_a|^2}{(\omega_a - \tilde{\omega}_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (27)$$

ce qui montre que les fréquences ω_a et ω_b des deux photons émis dans la cascade sont indépendantes.

Comme les variations de $|\mu_b|^2$ et $|\mu_a|^2$ avec ω_b et ω_a peuvent être négligées devant celles des dénominateurs, il apparaît sur (27) que les photons émis ont chacun une répartition spectrale lorentzienne centrée en $\tilde{\omega}_0$ et de largeur totale à mi-hauteur Γ .

Si l'on négligeait les interférences entre les deux amplitudes (24), on obtiendrait pour $I(\omega_a, \omega_b)$ la somme des carrés des modules des deux termes du crochet de (24). Le même calcul que celui fait à la fin du paragraphe C-2-c du chapitre III donnerait alors une répartition spectrale qui serait une superposition de deux lorentziennes centrées en $\tilde{\omega}_0$ mais de largeurs différentes, respectivement égales à $\Gamma_1 + \Gamma_0 = \Gamma$ et à $\Gamma_2 + \Gamma_1 = 3\Gamma$. L'interférence entre les amplitudes correspondant à des ordres temporels différents pour les émissions des deux photons entraîne donc que la répartition spectrale du rayonnement émis est la même, que l'oscillateur parte du niveau $|u_1\rangle$ ou du niveau $|u_2\rangle$.

e) Si l'oscillateur part du niveau $|u_3\rangle$, il y a maintenant $3! = 6$ amplitudes différentes à prendre en compte, correspondant aux six ordres possibles temporels d'émission des trois photons $k_a \epsilon_a$, $k_b \epsilon_b$, $k_c \epsilon_c$. Le calcul de la question c) précédente se généralise aisément et donne par exemple pour l'amplitude associée au processus où $k_c \epsilon_c$ est émis d'abord, puis $k_b \epsilon_b$ et enfin $k_a \epsilon_a$ le résultat

$$\frac{\sqrt{3!} \mu_a \mu_b \mu_c \exp \{ -i(\tilde{E}_0 + \hbar\omega_a + \hbar\omega_b + \hbar\omega_c)t/\hbar \}}{\hbar^3 (\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i\frac{\Gamma}{2})(\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma)(\omega_a + \omega_b + \omega_c - 3\tilde{\omega}_0 + 3i\frac{\Gamma}{2})} \quad (28)$$

Il faut maintenant sommer (28) sur toutes les permutations possibles des trois fréquences $\omega_a, \omega_b, \omega_c$.

Sommons tout d'abord (28) sur les $2!$ permutations laissant inchangé le premier photon émis ω_c . D'après les résultats de la question précédente

$$\sum_{\substack{\text{permutations} \\ \omega_a, \omega_b}} \frac{1}{(\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})(\omega_a + \omega_b - 2\tilde{\omega}_0 + i\Gamma)} = \\ = \frac{1}{(\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})(\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})} \quad (29)$$

L'amplitude de probabilité associée à l'ensemble des processus où le premier photon émis est $\mathbf{k}_c \mathbf{e}_c$, c'est-à-dire la somme de (28) sur toutes les permutations de $\mathbf{k}_a \mathbf{e}_a$ et $\mathbf{k}_b \mathbf{e}_b$, peut donc s'écrire d'après (29)

$$\frac{\sqrt{3!} \mu_a \mu_b \mu_c \exp \left\{ -i(\tilde{E}_0 + \hbar \omega_a + \hbar \omega_b + \hbar \omega_c)t/\hbar \right\} (\omega_c - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})}{\hbar^3 (\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})(\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})(\omega_c - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})(\omega_a + \omega_b + \omega_c - 3\tilde{\omega}_0 + 3i \frac{\Gamma}{2})} \quad (30)$$

On a multiplié (28) en haut et en bas par $[\omega_c - \tilde{\omega}_0 + i(\Gamma/2)]$.

Il faut maintenant sommer $n=3$ expressions analogues à (30) et différent par la fréquence du premier photon émis qui peut être soit ω_a , soit ω_b , soit ω_c . Comme les trois fractions ont même dénominateur, il suffit s'ajouter les numérateurs

$$\sum_{\omega_c} (\omega_c - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2}) = (\omega_a + \omega_b + \omega_c - 3\tilde{\omega}_0 + 3i \frac{\Gamma}{2}) \quad (31)$$

ce qui se simplifie avec le dernier terme du dénominateur de (30) et donne finalement pour l'amplitude globale le résultat

$$\frac{\sqrt{3!}}{\hbar^3} \exp \left\{ -i(\tilde{E}_0 + \hbar \omega_a + \hbar \omega_b + \hbar \omega_c)t/\hbar \right\} \times \\ \times \frac{\mu_a}{(\omega_a - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})} \times \frac{\mu_b}{(\omega_b - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})} \times \frac{\mu_c}{(\omega_c - \tilde{\omega}_0 + i \frac{\Gamma}{2})} \quad (32)$$

La densité de probabilité $I(\omega_a, \omega_b, \omega_c)$ donnant les fréquences des trois photons émis, qui est égale au carré du module de (32), est donc là encore factorisée, ce qui montre que les trois photons émis ont des fréquences indépendantes, réparties chacune suivant une lorentzienne centrée en $\tilde{\omega}_0$ et de largeur totale à mi-hauteur Γ .

La démonstration précédente peut être généralisée par récurrence au cas où l'oscillateur part d'un état excité $|u_n\rangle$ quelconque. Elle permet de montrer que l'interférence entre les $n!$ amplitudes correspondant aux $n!$ ordres temporels possibles des n photons émis à partir de $|u_n\rangle$ entraîne que la répartition spectrale du rayonnement émis par l'oscillateur est la même, quel que soit l'état d'excitation initiale de l'oscillateur.

16. PRINCIPE DU BILAN DÉTAILLÉ

Un système \mathcal{A} interagit avec un réservoir \mathcal{R} de façon que la théorie de la relaxation du chapitre IV soit applicable. On note E_a, E_b, E_c, \dots les niveaux d'énergie de \mathcal{A} , et E_μ, E_ν, \dots ceux du réservoir \mathcal{R} . Si V est l'hamiltonien de couplage, la probabilité de transition par unité de temps pour que le système \mathcal{A} passe de l'état $|c\rangle$ à l'état $|a\rangle$ s'écrit (voir la formule (C.5) du chapitre IV) :

$$\Gamma_{c \rightarrow a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} P_{\mu} \sum_{\nu} |\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|^2 \delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a) \quad (1)$$

où p_{μ} est la probabilité pour que le réservoir soit dans l'état $|\mu\rangle$.

Le réservoir étant à l'équilibre thermodynamique, vérifier la relation

$$\Gamma_{c \rightarrow a} e^{-E_c/k_B T} = \Gamma_{a \rightarrow c} e^{-E_a/k_B T} \quad (2)$$

Quelle est la conséquence de cette relation sur les flux de populations entre les niveaux c et a à l'équilibre thermodynamique du système \mathcal{A} ?

Solution

A l'équilibre thermodynamique, les populations des états microscopiques μ et ν du réservoir sont dans le rapport

$$\frac{P_{\mu}}{P_{\nu}} = \exp[-(E_{\mu} - E_{\nu})/k_B T] \quad (3)$$

Remplaçons alors dans (1) p_{μ} en fonction de p_{ν} et de l'exponentielle (3). Il vient :

$$\begin{aligned} \Gamma_{c \rightarrow a} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} \sum_{\nu} p_{\nu} |\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|^2 \exp[-(E_{\mu} - E_{\nu})/k_B T] \times \\ &\quad \times \delta[(E_{\mu} - E_{\nu}) - (E_a - E_c)] \end{aligned} \quad (4)$$

La fonction δ permet de remplacer dans l'exponentielle $E_{\mu} - E_{\nu}$ par $E_a - E_c$. L'exponentielle est alors indépendante de μ et ν , et peut être mise en facteur dans la somme. En intervertissant l'ordre des sommes sur ν et μ et en utilisant l'hermiticité de V qui entraîne que $|\langle \mu, c | V | \nu, a \rangle| = |\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|$, on peut mettre $\Gamma_{c \rightarrow a}$ sous la forme

$$\begin{aligned} \Gamma_{c \rightarrow a} &= \exp[-(E_a - E_c)/k_B T] \times \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\nu} p_{\nu} \sum_{\mu} |\langle \mu, c | V | \nu, a \rangle|^2 \delta(E_{\nu} + E_c - E_a - E_{\mu}) \\ &= \exp[-(E_a - E_c)/k_B T] \Gamma_{a \rightarrow c} \end{aligned} \quad (5)$$

D'où la relation (2).

A l'équilibre thermodynamique, les populations π_a'' et π_c'' des niveaux $|a\rangle$ et

$|c\rangle$ du petit système sont dans le rapport

$$\frac{\pi_a^s}{\pi_c^s} = \exp[-(E_a - E_c)/k_B T] \quad (6)$$

En regroupant (5) et (6), on obtient

$$\pi_a^s \Gamma_{a \rightarrow c} = \pi_c^s \Gamma_{c \rightarrow a} \quad (7)$$

Cette relation exprime que les flux de populations de a vers c et de c vers a s'équilibrent exactement. En généralisant ce résultat à toutes les transitions, on établit le principe de « bilan détaillé » qui exprime que les flux de populations entre les niveaux s'équilibrent sur chaque transition séparément.

17. ÉQUIVALENCE ENTRE UN CHAMP QUANTIQUE DANS UN ÉTAT COHÉRENT ET UN CHAMP EXTÉRIEUR

Des particules (charge q_α , masse m_α) interagissent avec le champ électromagnétique quantique. On se place en jauge de Coulomb et on suppose qu'à l'instant initial $t = 0$, chacun des modes du champ (repérés par l'indice j) est dans un état cohérent $|\alpha_j\rangle$ (ce peut être en particulier l'état vide du mode, $|0_j\rangle$)

$$|\psi(0)\rangle = |\cdots, \alpha_j, \cdots\rangle = |\{\alpha_j\}\rangle \quad (1)$$

Le but de cet exercice est de montrer qu'il est possible d'appliquer à l'hamiltonien de l'électrodynamique quantique une transformation unitaire telle que, dans la nouvelle représentation, les particules sont couplées d'une part à un champ extérieur classique, d'autre part au champ quantique initialement dans l'état vide (*).

a) On considère l'opérateur unitaire

$$T(t) = \prod_j T_j(t) \quad (2)$$

$$T_j(t) = \exp [\alpha_j^* e^{i\omega_j t} a_j - \alpha_j e^{-i\omega_j t} a_j^+] \quad (3)$$

où les α_j sont les nombres complexes apparaissant dans (1).

Calculer $T(t) a_j T^+(t)$ et $T(t) a_j^+ T^+(t)$. En déduire que le transformé $T(t) \mathbf{A}(\mathbf{r}) T^+(t)$ de l'opérateur potentiel vecteur transverse $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est la somme du champ quantique $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et d'un champ classique $\mathbf{A}_{Cl}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}, t)$ dont on donnera l'expression en fonction des α_j .

On pourra utiliser dans cet exercice l'identité

$$\exp(A + B) = \exp(A) \exp(B) \exp(-\frac{1}{2}[A, B]) \quad (4)$$

valable si $[A, B]$ commute avec A et B .

b) Quelle est la relation entre le vecteur d'état $|\psi'(t)\rangle$ dans la nouvelle représentation et le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans l'ancienne ? Montrer que le nouvel état initial $|\psi'(0)\rangle$ est le vide $|0\rangle$.

c) L'hamiltonien qui décrit la dynamique du système « champ + particules » en jauge de Coulomb s'écrit

$$H = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha} [\mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha)]^2 + V_{Coul} + H_R \quad (5)$$

(*) Voir par exemple B.R. Mollow, Phys. Rev. A12, 1919 (1975).

où V_{Coul} est l'interaction de Coulomb entre les particules et où H_R est l'hamiltonien du rayonnement

$$H_R = \sum_j \hbar \omega_j (a_j^+ a_j + \frac{1}{2}) \quad (6)$$

Montrer que, dans la nouvelle représentation, l'hamiltonien $H'(t)$ qui décrit la dynamique du système global s'écrit

$$H'(t) = T(t) H T^+(t) + i\hbar \left[\frac{d}{dt} T(t) \right] T^+(t) \quad (7)$$

d) Montrer que

$$T(t) H_R T^+(t) + i\hbar \left[\frac{d}{dt} T(t) \right] T^+(t) = H_R \quad (8)$$

En déduire l'expression de $H'(t)$. Interpréter physiquement cet hamiltonien.

e) Généraliser la démonstration précédente au cas où les particules chargées forment un atome neutre, localisé en $\mathbf{0}$, et où l'hamiltonien d'interaction est l'hamiltonien dipolaire électrique.

Solution

a) D'après la formule (67) de l'appendice, si $T_j = \exp(\lambda_j^* a_j - \lambda_j a_j^+)$, on a :

$$T_j a_j T_j^+ = a_j + \lambda_j \quad (9.a)$$

$$T_j a_i T_j^+ = a_i \quad \text{pour } j \neq i \quad (9.b)$$

Avec $\lambda_j = \alpha_j e^{-i\omega_j t}$, les équations (9) deviennent :

$$T a_j T^+ = a_j + \alpha_j e^{-i\omega_j t} \quad (10.a)$$

$$T a_j^+ T^+ = a_j^+ + \alpha_j^* e^{i\omega_j t} \quad (10.b)$$

Lorsqu'on remplace dans $T \mathbf{A}(\mathbf{r}) T^+$ les opérateurs $T a_j T^+$ et $T a_j^+ T^+$ par (10.a) et (10.b), on obtient

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = T \mathbf{A}(\mathbf{r}) T^+ = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_{Cl}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}, t) \quad (11)$$

où

$$\mathbf{A}_{Cl}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}, t) = \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_j L^3}} [\alpha_j \mathbf{e}_j e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_j t)} + \alpha_j^* \mathbf{e}_j e^{-i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_j t)}] \quad (12)$$

b) Dans la nouvelle représentation, l'état du système est représenté par

$$|\psi'(t)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle \quad (13)$$

A l'instant $t = 0$,

$$|\psi'(0)\rangle = T(0) |\psi(0)\rangle = T(0) |\{\alpha_j\}\rangle \quad (14)$$

Or, d'après la formule (65) de l'appendice

$$|\alpha_j\rangle = \exp(\alpha_j a_j^+ - \alpha_j^* a_j) |0_j\rangle = T_j^+(0) |0_j\rangle \quad (15)$$

Soit encore

$$|0_j\rangle = T_j(0) |\alpha_j\rangle \quad (16)$$

et en prenant le produit sur tous les modes

$$|0\rangle = T(0) |\{\alpha_j\}\rangle \quad (17)$$

La comparaison avec (14) montre que :

$$|\psi'(0)\rangle = |0\rangle \quad (18)$$

c) L'équation d'évolution du nouveau vecteur d'état est

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = i\hbar \left(\frac{d}{dt} T(t) \right) |\psi(t)\rangle + T(t) i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (19)$$

L'équation de Schrödinger dans l'ancienne représentation donne $i\hbar d|\psi(t)\rangle/dt = H|\psi(t)\rangle$. En introduisant $T^+T = 1$ à gauche de $|\psi(t)\rangle$, on obtient alors

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle &= \left[i\hbar \left(\frac{d}{dt} T(t) \right) T^+(t) + T(t) HT^+(t) \right] T(t) |\psi(t)\rangle \\ &= H'(t) |\psi'(t)\rangle \end{aligned} \quad (20)$$

d) Calculons d'abord $i\hbar [dT(t)/dt] T^+(t)$. Il convient de noter que, si $X(t)$ ne commute pas avec $dX(t)/dt$, alors $d\exp[X(t)]/dt \neq [dX(t)/dt] \exp[X(t)]$. Il faut donc, avant de dériver, séparer les facteurs en a et a^+ en utilisant la formule (4). Le calcul se présente sous la forme suivante :

$$T_j(t) = \exp(\alpha_j^* e^{i\omega_j t} a_j) \exp(-\alpha_j e^{-i\omega_j t} a_j^+) \exp(\frac{1}{2} \alpha_j \alpha_j^*) \quad (21)$$

$$\frac{d}{dt} T_j(t) = i\omega_j \alpha_j^* e^{i\omega_j t} a_j T_j(t) + i\omega_j \alpha_j e^{-i\omega_j t} T_j(t) a_j^+ \quad (22)$$

$$T_j(t) a_j^+ = T_j(t) a_j^+ T_j^+(t) T_j(t) = (a_j^+ + \alpha_j^* e^{i\omega_j t}) T_j(t) \quad (23)$$

$$\left[\frac{d}{dt} T_j(t) \right] T_j^+(t) = i\omega_j (\alpha_j^* e^{i\omega_j t} a_j + \alpha_j e^{-i\omega_j t} a_j^+ + \alpha_j^* \alpha_j) \quad (24)$$

$$i\hbar \left[\frac{d}{dt} T(t) \right] T^+(t) = - \sum_j \hbar \omega_j [\alpha_j^* e^{i\omega_j t} a_j + \alpha_j e^{-i\omega_j t} a_j^+ + \alpha_j^* \alpha_j] \quad (25)$$

Par ailleurs, d'après (10.a) et (10.b),

$$T(t) H_R T^+(t) = \sum_j \hbar \omega_j [(a_j^+ + \alpha_j^* e^{i\omega_j t})(a_j + \alpha_j e^{-i\omega_j t}) + \frac{1}{2}] \quad (26)$$

En ajoutant (25) et (26), on obtient la formule (8).

La transformation $T(t)$ n'agit pas sur \mathbf{r}_a et \mathbf{p}_a . Elle laisse V_{Coul} inchangée et, d'après (11), change $\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a)$ en $\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) - q_a \mathbf{A}_{CI}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}_a, t)$, de sorte que le nouvel

hamiltonien $H'(t)$ s'écrit :

$$H'(t) = \sum_a \frac{1}{2m_a} [\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) - q_a \mathbf{A}_{Cl}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}_a, t)]^2 + V_{Coul} + H_R \quad (27)$$

Cet hamiltonien décrit des particules interagissant avec le champ quantique $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et avec le champ classique $\mathbf{A}_{Cl}(\{\alpha_j\}; \mathbf{r}_a, t)$. L'état initial du champ quantique est maintenant le vide, d'après (18). Ainsi, nous avons montré une complète équivalence entre un champ quantique dans un état cohérent, et le champ classique correspondant auquel s'ajoute le champ du vide.

e) Dans le point de vue dipolaire électrique, l'hamiltonien d'interaction du champ avec la particule s'écrit (voir Appendice, § 5-d)

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(0) \quad (28)$$

La transformation $T(t)$ n'agit que sur $\mathbf{E}_\perp(0)$ qu'elle transforme en $\mathbf{E}_\perp(0) + \mathbf{E}_{Cl}(\{\alpha_j\}; 0, t)$ avec

$$\mathbf{E}_{Cl}(\{\alpha_j\}; 0, t) = i \sum_j \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2 \epsilon_0 L^3}} [\alpha_j \epsilon_j e^{-i \omega_j t} - \alpha_j^* \epsilon_j^* e^{+i \omega_j t}] \quad (29)$$

On obtient ainsi

$$H''_I = - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{E}_\perp(0) + \mathbf{E}_{Cl}(\{\alpha_j\}; 0, t)] \quad (30)$$

tandis que l'hamiltonien des particules est inchangé et que l'hamiltonien du rayonnement est transformé comme dans la question précédente. On retrouve le même résultat : dans la nouvelle représentation, les particules interagissent avec le champ électrique classique associé aux α_j , et avec le champ du vide.

18. ÉLIMINATION ADIABATIQUE DES COHÉRENCES ET TRANSFORMATION DES ÉQUATIONS DE BLOCH OPTIQUES EN ÉQUATIONS DE RELAXATION

Le but de cet exercice est d'étudier une situation physique où les éléments non diagonaux de la matrice densité d'un atome (cohérences) évoluent beaucoup plus rapidement que les populations de ces niveaux. Les cohérences peuvent alors être réexprimées à chaque instant en fonction des populations et les équations de Bloch optiques transformées en équations de relaxation pour les seules populations.

Un atome à deux niveaux (a : état fondamental ; b : état excité, de largeur naturelle Γ , avec $E_b - E_a = \hbar\omega_0$) interagit avec un champ laser incident de fréquence ω_L , d'amplitude \mathcal{E}_0 . Les équations de Bloch optiques décrivant l'évolution de la matrice densité σ_{ij} ($i, j = a$ ou b) d'un tel atome s'écrivent (voir formule (A.13) du chapitre V) :

$$\frac{d\sigma_{bb}}{dt} = i(\Omega_1/2)(\hat{\sigma}_{ba} - \hat{\sigma}_{ab}) - \Gamma \sigma_{bb} \quad (1.a)$$

$$\frac{d\sigma_{aa}}{dt} = -i(\Omega_1/2)(\hat{\sigma}_{ba} - \hat{\sigma}_{ab}) + \Gamma \sigma_{bb} \quad (1.b)$$

$$\frac{d\hat{\sigma}_{ab}}{dt} = -i\delta_L \hat{\sigma}_{ab} - i(\Omega_1/2)(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) - (\Gamma/2)\hat{\sigma}_{ab} \quad (1.c)$$

On a posé $\hat{\sigma}_{ab} = \sigma_{ab} \exp(-i\omega_L t) = (\hat{\sigma}_{ba})^*$, $\delta_L = \omega_L - \omega_0$. La fréquence de Rabi Ω_1 est définie par $\Omega_1 = -\mathbf{d}_{ab} \cdot \mathcal{E}_0 / \hbar$, où \mathbf{d}_{ab} est l'élément de matrice supposé réel du dipôle atomique \mathbf{d} .

Cet atome est soumis de plus à des collisions élastiques avec un gaz de perturbateurs, qui n'induisent pas de transferts entre a et b , et dont le seul effet est de déphaser le dipôle atomique. L'effet de ces collisions sur σ_{ij} se traduit donc par un amortissement supplémentaire des cohérences $\hat{\sigma}_{ab}$, de la forme

$$\left(\frac{d\hat{\sigma}_{ab}}{dt} \right)_{\text{coll}} = -\gamma \hat{\sigma}_{ab} \quad (2)$$

(le déplacement collisionnel de la raie est supposé inclus dans ω_0). Les populations σ_{aa} et σ_{bb} ne sont pas affectées par les collisions.

- On suppose que les vitesses de variation dues respectivement au couplage avec l'onde laser et aux collisions peuvent être ajoutées indépendamment. Ecrire l'équation d'évolution de la cohérence $\hat{\sigma}_{ab}$.
- On considère tout d'abord le régime stationnaire. Exprimer dans ce cas $\hat{\sigma}_{ab}$ en fonction de $(\sigma_{bb} - \sigma_{aa})$ et en déduire l'expression σ_{bb}^{st} de σ_{bb} en régime stationnaire.

Sachant que l'intensité totale de la lumière émise par l'atome est proportionnelle à $\Gamma \sigma_{bb}^g$, indiquer comment cette intensité émise varie avec γ à la limite $|\delta_L| \gg \gamma, \Gamma, \Omega_1[1 + (2\gamma/\Gamma)]^{\frac{1}{2}}$. Comment interprétez-vous ce résultat ?

- c) On considère à présent une situation où $\gamma \gg \Gamma$. On suppose également que les populations évoluent très peu sur un temps de l'ordre de γ^{-1} . Montrer qu'il est possible alors de considérer que les cohérences s'adaptent à chaque instant à l'évolution lente des populations. Quelle est l'expression correspondante de σ_{ab} en fonction de σ_{aa} et σ_{bb} ?
- d) Reporter l'expression précédente de σ_{ab} dans les équations d'évolution des populations. Montrer que les équations obtenues s'interprètent en termes de taux d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée entre les niveaux a et b . Calculer le taux Γ' d'absorption et d'émission induite en fonction de γ , δ_L et Ω_1 .
- e) A quelle condition doit satisfaire Ω_1 pour que l'hypothèse de variation lente des populations, utilisée dans la question c, soit valable ?

Solution

- a) L'équation d'évolution de σ_{ab} est

$$\frac{d\sigma_{ab}}{dt} = -i\delta_L \sigma_{ab} - i\frac{\Omega_1}{2}(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) - \frac{\Gamma}{2}\sigma_{ab} - \gamma\sigma_{ab} \quad (3)$$

- b) En régime stationnaire, $d\sigma_{ab}/dt = 0$ et l'équation (3) donne

$$\sigma_{ab} = \frac{-i\frac{\Omega_1}{2}(\sigma_{bb} - \sigma_{aa})}{\left(\gamma + \frac{\Gamma}{2}\right) + i\delta_L} \quad (4)$$

En reportant cette valeur et celle de $\sigma_{ba} = \sigma_{ab}^*$ dans l'équation (1.a) ou (1.b), on trouve une équation dont la solution en régime stationnaire est (compte tenu de $\sigma_{aa}^g + \sigma_{bb}^g = 1$) :

$$\sigma_{bb}^g = \frac{\Omega_1^2}{4} \frac{\left(1 + \frac{2\gamma}{\Gamma}\right)}{\delta_L^2 + \left(\frac{\Gamma}{2} + \gamma\right)^2 + \frac{\Omega_1^2}{2}\left(1 + \frac{2\gamma}{\Gamma}\right)} \quad (5)$$

A la limite considérée dans l'énoncé, nous trouvons

$$\Gamma \sigma_{bb}^g = \frac{\Omega_1^2}{4\delta_L^2} (\Gamma + 2\gamma) \quad (6)$$

Le terme proportionnel à Γ est associé à la diffusion Rayleigh et celui proportionnel à γ correspond à une émission à la fréquence ω_0 consécutive à une excitation assistée par collisions (voir complément $B_{\gamma i}$ et en particulier la figure 1 et la formule (43)).

c) Si $\sigma_{bb} - \sigma_{aa}$ était constant, $\dot{\sigma}_{ab}$ tendrait vers la valeur stationnaire (4) avec une constante de temps qui est égale, d'après l'équation (3) à l'inverse de $\gamma + (\Gamma/2) = \gamma$. On en déduit que si $\sigma_{bb} - \sigma_{aa}$ varie lentement à l'échelle du temps γ^{-1} , $\dot{\sigma}_{ba}$ peut s'adapter quasi-instantanément à ces variations lentes de $\sigma_{bb} - \sigma_{aa}$ et prendre à chaque instant la valeur donnée par l'équation (4).

d) En portant l'équation (4) dans les équations (1.a) et (1.b), nous trouvons

$$d\sigma_{bb}/dt = \Gamma'(\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) - \Gamma \sigma_{bb} \quad (7.a)$$

$$d\sigma_{aa}/dt = \Gamma'(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) + \Gamma \sigma_{bb} \quad (7.b)$$

avec

$$\Gamma' = \frac{\Omega_1^2}{2} \frac{\gamma + \frac{\Gamma}{2}}{\left(\gamma + \frac{\Gamma}{2}\right)^2 + \delta_L^2} = \frac{\Omega_1^2}{2} \frac{\gamma}{\gamma^2 + \delta_L^2} \quad (8)$$

Les équations (7) ayant la même structure que les équations (E.15) du chapitre IV, l'interprétation en termes d'absorption, d'émission induite et d'émission spontanée, s'en déduit immédiatement.

e) D'après les équations (7), le temps d'évolution caractéristique de $\sigma_{bb} - \sigma_{aa}$ est $(\Gamma + 2\Gamma')^{-1}$. Ce temps est long devant γ^{-1} si

$$\Omega_1^2 \frac{\gamma}{\gamma^2 + \delta_L^2} \ll \gamma \quad (9)$$

c'est-à-dire encore si

$$\Omega_1^2 \ll (\gamma^2 + \delta_L^2) \quad (10)$$

Les équations (7) ne sont donc valables que si la saturation par le champ intense est suffisamment faible.

19. SUSCEPTIBILITÉ NON LINÉAIRE POUR UN ENSEMBLE D'ATOMES À DEUX NIVEAUX. ÉTUDE DE QUELQUES APPLICATIONS

On considère un milieu dilué constitué d'atomes à deux niveaux a et b . Ces atomes, supposés immobiles, interagissent avec une onde plane $\mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})$ se propageant dans le plan $x0y$. On suppose que l'élément de matrice du dipôle électrique d_{ab} est aligné le long de $0z$ tout comme le champ \mathcal{E}_0 de l'onde incidente. Pour simplifier, on considérera dans la suite ces quantités comme des grandeurs scalaires.

La valeur moyenne du dipôle atomique $\langle d \rangle$ peut être écrite sous la forme

$$\langle d \rangle = \epsilon_0 \operatorname{Re}(\alpha' + i\alpha'') \mathcal{E}_0 e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})} \quad (1)$$

où $\alpha = \alpha' + i\alpha''$ est la polarisabilité de l'atome. Le but de cet exercice est d'étudier les non-linéarités de la polarisabilité α et d'appliquer les résultats obtenus aux problèmes de l'autofocalisation et de la génération d'une onde conjuguée vers l'avant.

a) La susceptibilité $\chi = \chi' + i\chi''$ du milieu est égale au produit $N\alpha$ du nombre N d'atomes par unité de volume par la polarisabilité atomique α . En utilisant les résultats du chapitre V, montrer que χ' et χ'' sont respectivement égaux à

$$\chi' = -\frac{N |d_{ab}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\delta_L}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (2.a)$$

$$\chi'' = \frac{N |d_{ab}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\Gamma/2}{\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2}} \quad (2.b)$$

où Γ est la largeur naturelle du niveau b , $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ est l'écart à résonance et $\Omega_1 = -d_{ab} \mathcal{E}_0 / \hbar$ est la fréquence de Rabi.

b) On étudie la situation où $|\delta_L| \gg \Gamma$ et on rappelle que l'indice d'un milieu dilué est égal à $1 + (\chi'/2)$. On suppose que la distribution du champ dans le plan perpendiculaire à la direction de propagation \mathbf{k}_L n'est pas uniforme et qu'elle est de la forme $\mathcal{E}_0 \exp(-r^2/r_0^2)$ à l'entrée du milieu (\mathbf{k}_L coïncide avec $0x$ et r^2 est égal à $y^2 + z^2$). Sans entrer dans le détail des calculs, indiquer pourquoi l'onde a tendance à être défocalisée lorsque $\omega_L < \omega_0$ et pourquoi elle a tendance à être focalisée lorsque $\omega_L > \omega_0$.

c) On considère à présent le cas où le champ incident est constitué de deux ondes planes, de même fréquence et de même polarisation parallèle à $0z$, mais se propageant dans des directions différentes dans le plan $x0y$. Ces deux ondes sont notées $\mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})$ et

$\mathcal{E}_p \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})$ et on suppose $\mathcal{E}_p \ll \mathcal{E}_0$. Calculer $\langle d \rangle$ à l'ordre 1 en \mathcal{E}_p et en déduire les polarisabilités α'_p et α''_p pour l'onde faible. Démontrer que les susceptibilités pour l'onde \mathcal{E}_p , $\chi'_p = N\alpha'_p$ et $\chi''_p = N\alpha''_p$ ne dépendent pas de la direction de propagation de l'onde faible.

Montrer également que $\langle d \rangle$ présente une composante oscillant comme $\exp[-i(\omega_L t - \mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r})]$ avec $\mathbf{k}_c = 2\mathbf{k}_L - \mathbf{k}_p$, susceptible de générer un champ dans la direction \mathbf{k}_c .

d) On suppose $|\delta_L| \gg \Gamma$. En utilisant les valeurs de χ'_p et χ' trouvées précédemment, calculer l'angle θ que doivent faire \mathbf{k}_L et \mathbf{k}_p pour que la condition d'accord de phase soit exactement vérifiée (la génération de l'onde dans la direction \mathbf{k}_c est alors la plus intense possible). Est-il possible de réaliser cette condition quel que soit le signe de δ_L ?

Solution

a) En utilisant les relations (A.21) et (C.3) du chapitre V et en supposant \mathbf{k}_L parallèle à $0x$, nous trouvons

$$\langle d \rangle = -\frac{\mathbf{d}_{ab}(\mathbf{d}_{ab}, \mathcal{E}_0)}{\hbar \left[\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2} \right]} \left[\delta_L \cos(\omega_L t - k_L x) - \frac{\Gamma}{2} \sin(\omega_L t - k_L x) \right] \quad (3)$$

Comme \mathbf{d}_{ab} et \mathcal{E}_0 sont tous deux alignés le long de $0z$, (3) peut être réécrit :

$$\langle d \rangle = \frac{|d_{ab}|^2}{\hbar \left[\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2} \right]} \left[-\delta_L \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - k_L x) + \frac{\Gamma}{2} \mathcal{E}_0 \sin(\omega_L t - k_L x) \right] \quad (4)$$

Par ailleurs, la relation (1) entraîne que

$$\langle d \rangle = \epsilon_0 [\alpha' \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - k_L x) + \alpha'' \mathcal{E}_0 \sin(\omega_L t - k_L x)] \quad (5)$$

La comparaison de (4) et (5) redonne bien les formules (2) de l'énoncé. Ces formules montrent que χ' et χ'' sont des fonctions décroissantes de l'intensité du champ incident (à cause du facteur $\Omega_1^2 = d_{ab}^2 \mathcal{E}_0^2 / \hbar^2$ du dénominateur). A très forte intensité, la dispersion et l'absorption tendent vers 0. En fonction de δ_L , χ' atteint ses extrema lorsque $\delta_L = \pm \sqrt{(\Gamma^2/4) + (\Omega_1^2/2)}$ et change de signe pour $\delta_L = 0$. Quant à χ'' , il est maximum pour $\delta_L = 0$ et est divisé par 2 pour $\delta_L = \pm \sqrt{(\Gamma^2/4) + (\Omega_1^2/2)}$.

b) L'indice du milieu, qui est égal à $1 + (\chi'/2)$, n'est pas le même en tout point de l'espace puisque Ω_1^2 , qui est proportionnel à \mathcal{E}_0^2 , n'est pas constant dans le plan perpendiculaire à \mathbf{k}_L . Dans le cas où $\delta_L = \omega_L - \omega_0 < 0$, χ' est positif, mais par suite des effets de saturation, sa valeur au centre du faisceau est plus petite que sur les ailes. La longueur optique d'une tranche d'épaisseur δz du milieu est plus courte pour le rayon

central que pour les rayons latéraux : le milieu se comporte comme une lentille divergente et il y a autodéfocalisation du faisceau (*).

Lorsque $\omega_L > \omega_0$, la susceptibilité χ' est négative. Comme $|\chi'|$ est plus petit au centre du faisceau que sur les bords par suite de la saturation, l'indice est plus grand au centre du faisceau que sur les ailes. Il s'ensuit que le milieu se comporte alors comme une lentille convergente : il y a autofocalisation. Si le milieu est suffisamment long, la dimension transverse du faisceau diminue au cours de sa propagation mais la saturation du milieu empêche que cette dimension ne tende vers 0. En effet, au fur et à mesure que la focalisation augmente, le champ au centre croît ainsi que la fréquence de Rabi. Lorsque celle-ci devient supérieure à $|\delta_L|$, la susceptibilité χ' au voisinage du centre du faisceau n'est pratiquement plus sensible aux variations transverses d'intensité à cause de la saturation et les effets de lentille sont ainsi fortement atténusés. La compétition avec les effets de diffraction conduit alors à la propagation d'une onde de dimension transverse constante dans le milieu (**).

c) La valeur moyenne du dipôle atomique est maintenant donnée par :

$$\langle d \rangle = \epsilon_0 \operatorname{Re}(\tilde{\alpha}' + i\tilde{\alpha}'') (\mathcal{E}_0 e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})} + \mathcal{E}_p e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})}) \quad (6)$$

où $\tilde{\alpha}'$ et $\tilde{\alpha}''$ sont donnés par des formules analogues à celles de la question a), au remplacement près de Ω_1^2 par $d_{ab}^2 |\mathcal{E}_0 \exp(i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}) + \mathcal{E}_p \exp(i\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})|^2 / \hbar^2$. A l'ordre 1 en \mathcal{E}_p , ce dernier terme s'écrit

$$\Omega_1^2 + \frac{d_{ab}^2}{\hbar^2} [\mathcal{E}_0 \mathcal{E}_p e^{i(\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} + \mathcal{E}_0 \mathcal{E}_p e^{-i(\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})}] \quad (7)$$

En développant $\tilde{\alpha}'$ et $\tilde{\alpha}''$ à l'ordre 1 en \mathcal{E}_p , nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= \epsilon_0 \operatorname{Re}(\alpha' + i\alpha'') \mathcal{E}_0 e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r})} + \\ &+ \epsilon_0 \operatorname{Re} \left[\alpha' + i\alpha'' + \left(\frac{d\alpha'}{d\Omega_1^2} + i \frac{d\alpha''}{d\Omega_1^2} \right) \frac{d_{ab}^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \right] \mathcal{E}_p e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} + \\ &+ \epsilon_0 \operatorname{Re} \left(\frac{d\alpha'}{d\Omega_1^2} + i \frac{d\alpha''}{d\Omega_1^2} \right) \frac{d_{ab}^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} \mathcal{E}_p e^{-i[\omega_L t - (2\mathbf{k}_L - \mathbf{k}_p) \cdot \mathbf{r}]} \end{aligned} \quad (8)$$

Du second terme de (8), nous déduisons

$$\alpha'_p = \alpha' + \Omega_1^2 \frac{d\alpha'}{d\Omega_1^2} = - \frac{d_{ab}^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\delta_L \left(\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \right)}{\left(\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2} \right)^2} \quad (9.a)$$

$$\alpha''_p = \alpha'' + \Omega_1^2 \frac{d\alpha''}{d\Omega_1^2} = \frac{d_{ab}^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\frac{\Gamma}{2} \left(\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \right)}{\left(\delta_L^2 + \frac{\Gamma^2}{4} + \frac{\Omega_1^2}{2} \right)^2} \quad (9.b)$$

(*) Pour plus de détails sur les effets d'autodéfocalisation et d'autofocalisation, voir Shen (chapitre 17) ou S.A. Akhmanov, R.V. Khokhlov et A.P. Sukhorukov dans Laser Handbook 2, F.T. Arecchi and E.O. Schulz-Dubois eds., p. 1151, North Holland 1972.

(**) Voir A. Javan and P.L. Kelley, I.E.E.E. J. of Quant. Elect. QE2, 470 (1966).

La susceptibilité $\chi_p = N\alpha_p$ pour l'onde faible \mathcal{E}_p diffère donc de la susceptibilité (2) trouvée pour l'onde intense. Ainsi, quand Ω_1 augmente, χ'_p et χ''_p tendent vers 0 plus vite que χ' et χ'' . Même pour des situations où $\delta_L^2 + (\bar{F}^2/4) > \Omega_1^2$, χ'_p et χ''_p ne coïncident avec χ' et χ'' que pour le terme indépendant de Ω_1^2 (susceptibilité linéaire habituelle). Le premier terme non linéaire de la susceptibilité, qui est proportionnel à Ω_1^2 , est, dans cette limite, deux fois plus grand en module pour l'onde faible que pour l'onde intense. Il est clair enfin sur les équations (9) que α_p , et donc χ_p , ne dépendent pas de la direction de \mathbf{k}_p .

Le troisième terme de la formule (8) correspond à un terme source dans les équations de Maxwell permettant de générer un champ se propageant dans la direction \mathbf{k}_c .

d) Pour que la génération de l'onde dans la direction \mathbf{k}_c soit importante, il faut que les champs rayonnés par des plans successifs d'atomes soient en phase. Cela nécessite que la période spatiale du champ des dipôles, égale à $|\mathbf{k}_c|^{-1} = |2\mathbf{k}_L - \mathbf{k}_p|^{-1}$, coïncide avec la longueur d'onde pour une onde faible de fréquence ω_L , qui est égale à $c/\omega_L[1 + (\chi'_p/2)]$. Comme cette dernière quantité est aussi égale à $|\mathbf{k}_p|^{-1}$, il faut donc pouvoir construire un triangle isocèle de côtés $\mathbf{k}_c = 2\mathbf{k}_L - \mathbf{k}_p$ et \mathbf{k}_p et dont la hauteur soit \mathbf{k}_L (fig. 1.b).

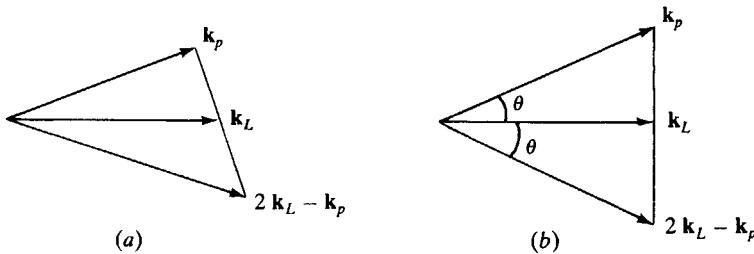


Figure 1. Disposition des vecteurs d'onde :
a) dans le cas général ; b) dans le cas où il y a accord de phase.

La géométrie de la figure 1.b est réalisée lorsque

$$k_p \cos \theta = k_L \quad (10)$$

c'est-à-dire, pour des angles θ petits, lorsque

$$\frac{\omega_L}{c} \left(1 + \frac{\chi'_p}{2} \right) \left(1 - \frac{\theta^2}{2} \right) = \frac{\omega_L}{c} \left(1 + \frac{\chi'}{2} \right) \quad (11)$$

L'angle θ est donc donné par l'équation

$$\theta^2 = (\chi'_p - \chi') \quad (12)$$

c'est-à-dire encore, d'après (2.a) et (9.a) à la limite $|\delta_L| \gg \Gamma$

$$\theta^2 = \frac{N |d_{ab}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\delta_L \frac{\Omega_1^2}{2}}{\left[\delta_L^2 + \frac{\Omega_1^2}{2} \right]^2} \quad (13)$$

On constate que cette équation n'a de solution que pour $\delta_L > 0$. L'angle θ est une fonction croissante de δ_L pour $0 < \delta_L < \Omega_1/\sqrt{6}$ puis une fonction décroissante au delà. En fonction de la susceptibilité linéaire $\chi_0 = -N |d_{ab}|^2 / \epsilon_0 \hbar \delta_L$

$$\theta^2 = -\chi_0 \frac{\delta_L^2 \frac{\Omega_1^2}{2}}{\left[\delta_L^2 + \frac{\Omega_1^2}{2} \right]^2} \quad (14)$$

ce qui montre que θ reste toujours inférieur à $\sqrt{|\chi_0|}$.

20. ABSORPTION D'UNE ONDE SONDE PAR DES ATOMES SOUMIS À UNE ONDE INTENSE. APPLICATION À L'ABSORPTION SATURÉE

On considère un ensemble d'atomes à deux niveaux a, b (fréquence de résonance ω_0 , état excité b de largeur naturelle Γ) interagissant avec une onde plane monochromatique de fréquence ω . Le champ électrique de cette onde est suffisamment intense pour que la condition $\Omega_1 \gg \Gamma$ soit toujours vérifiée (Ω_1 étant la fréquence de Rabi). On utilisera la méthode de l'atome habillé, exposée dans le chapitre VI, pour décrire l'ensemble constitué par un atome et le mode laser.

Le but de cet exercice est de décrire la transmission d'une seconde onde faible qui « sonde » un tel milieu. Les atomes seront tout d'abord supposés immobiles (partie A) et on étudiera comment la transmission de l'onde sonde varie en fonction de sa fréquence ω' . On envisagera ensuite le cas d'atomes en mouvement (partie B) pour lesquels l'élargissement Doppler est grand devant Ω_1 et on calculera l'absorption d'une onde sonde de même fréquence que l'onde intense et se dirigeant dans une direction opposée (spectre d'absorption saturée). Dans tout l'exercice, les dipôles atomiques ainsi que les polarisations des champs sont supposés être parallèles à un même axe $0x$, de sorte que leur caractère vectoriel pourra être ignoré.

A. Effet d'une onde intense sur l'absorption d'une onde faible

a) On rappelle que l'opérateur d associé au dipôle de l'atome est égal à $d_+ + d_-$ avec $d_{\pm} = d_{ab} \mathcal{S}_{\pm}$, où $\mathcal{S}_+ = |b\rangle\langle a|$, $\mathcal{S}_- = |a\rangle\langle b|$ et $d_{ab} = \langle a|d|b\rangle$ (d_{ab} est supposé réel.) On rappelle également que les éléments de matrice réduits de l'opérateur densité σ de l'atome habillé sont définis par $\sigma_{ij}^{(p)} = \sum_N \langle i(N-p)|\sigma|j(N)\rangle$, où les $|i(N)\rangle$ (avec

$i = 1, 2$) sont les niveaux habillés de la multiplicité \mathcal{E}_N (voir chapitre VI, formule (D.28)): Exprimer $\langle d_- \rangle$ en fonction de d_{ab} , $\sigma_{ij}^{(p)}$ et de l'angle θ défini par $\cotg 2\theta = (\omega_0 - \omega)/\Omega_1$ ($0 \leq 2\theta < \pi$).

b) On considère d'abord le cas où l'atome interagit uniquement avec l'onde intense. Que vaut dans ce cas $\langle d_- \rangle$ en régime quasi stationnaire ? On exprimera le résultat en fonction de d_{ab} , Ω_1 , ω_0 et ω .

c) Les atomes interagissent maintenant avec l'onde intense et l'onde sonde. Cette dernière est décrite classiquement par un champ électrique $\mathcal{E}' \cos(\omega't - \varphi')$ d'amplitude \mathcal{E}' et de phase φ' . A l'approximation de l'onde tournante, l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et l'onde

sonde est :

$$V = \frac{\hbar\Omega'_1}{2} [e^{-i(\omega't - \varphi')} \mathcal{S}_+ + e^{i(\omega't - \varphi')} \mathcal{S}_-] \quad (1)$$

avec $\hbar\Omega'_1 = -d_{ab}\mathcal{E}'$.

Ecrire les équations d'évolution des éléments de matrice réduits $\sigma_{ij}^{(p)}$ (on pourra poser $\Delta^{(p)} = \sigma_{22}^{(p)} - \sigma_{11}^{(p)}$). Quelle est en régime quasi stationnaire la solution de ces équations à l'ordre 0 en Ω'_1 ?

d) On se propose maintenant d'étudier par la théorie des perturbations la solution à l'ordre 1 en Ω'_1 des équations précédentes. Calculer les éléments de matrice réduits $\sigma_{ij}^{(p)}$ proportionnels à $\Omega'_1 e^{i\varphi'}$ et dont la dépendance temporelle est en $e^{-i\omega't}$.

e) Calculer la composante de $\langle d_- \rangle$ évoluant en $\Omega'_1 e^{-i(\omega't - \varphi')}$. On pose

$$\langle d_- \rangle = \frac{\epsilon_0}{2} (\alpha' + i\alpha'') \mathcal{E}' e^{-i(\omega't - \varphi')} \quad (2)$$

α' est associé à la dispersion du milieu et α'' à son absorption. Calculer α'' . Pour quelles valeurs de $(\omega' - \omega)$ α'' est-il résonnant ? Indiquer si ces résonances correspondent à une atténuation ou à une amplification et donner l'origine physique des résultats obtenus.

B. Absorption saturée

On suppose à présent que l'onde intense et l'onde sonde ont même fréquence ω_L dans le référentiel du laboratoire, mais que ces ondes se propagent le long de $0z$ dans des sens opposés. De plus, les atomes ont maintenant une vitesse non nulle de sorte que les fréquences des deux ondes subissent dans le référentiel au repos de l'atome des déplacements Doppler opposés

$$\omega = \omega_L + kv_z \quad (3.a)$$

$$\omega' = \omega_L - kv_z \quad (3.b)$$

où v_z est la projection de la vitesse atomique sur $0z$.

Pour obtenir l'absorption (ou la dispersion) moyenne de l'onde sonde, il faut moyenner le résultat de la formule (2) sur la distribution des vitesses après avoir remplacé ω et ω' par les expressions (3.a) et (3.b). On obtient ainsi le dipôle moyen :

$$\overline{\langle d_- \rangle} = \frac{1}{u\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle d_-(v_z) \rangle \exp[-(v_z^2/u^2)] dv_z \quad (4)$$

qui est une fonction de $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ (le paramètre u vaut $\sqrt{2k_B T/m}$). Rappelons que Ω_1 est supposé très petit devant la largeur Doppler ku . On se propose de calculer la partie imaginaire de la polarisabilité moyenne (qui sera notée $\overline{\alpha''}$) pour $|\delta_L| \ll ku$.

f) On suppose δ_L fixé et vérifiant la condition $|\delta_L| \ll ku$. Quelles sont les classes de vitesse qui interagissent de façon résonnante avec le champ sonde ?

Montrer que, pour ces classes de vitesse, $|v_z| \ll u$ et en déduire que l'on peut remplacer $\exp[-(v_z^2/u^2)]$ par 1 dans (4).

g) Donner l'expression de $\cot g 2\theta$ en fonction de δ_L , kv_z et Ω_1 . On pose $s = tg \theta$ (s varie de 0 à $+\infty$). Montrer que

$$\overline{\alpha''} = \frac{|d_{ab}|^2}{2\epsilon_0 \sqrt{\pi} ku} \int_0^{+\infty} \frac{ds}{s^2} \frac{1-s^2}{1+s^4} \left[-\frac{s^4 \epsilon(s)}{\epsilon^2(s) + f_1^2(s)} + \frac{\epsilon(s)}{\epsilon^2(s) + f_2^2(s)} \right] \quad (5)$$

avec

$$f_1(s) = 2 \frac{\delta_L}{\Omega_1} + \frac{3-s^2}{2s} \quad (6.a)$$

et

$$f_2(s) = f_1 \left(-\frac{1}{s} \right) = \frac{2\delta_L}{\Omega_1} + \frac{1-3s^2}{2s} \quad (6.b)$$

$\epsilon(s)$ étant une quantité petite égale à

$$\epsilon(s) = \frac{\Gamma}{\Omega_1} \left[\frac{1}{2} + \frac{s^2}{(1+s^2)^2} \right] \quad (6.c)$$

h) Soit s_1 la racine positive de $f_1(s) = 0$, s_2 celle de $f_2(s) = 0$. Calculer s_1 et s_2 et montrer que $s_2 = s_1/3$. Exprimer $(s_1/3) - (1/s_1)$, $(s_1/3)^2 + (1/s_1)^2$ et $(s_1/3)^4 + (1/s_1)^4$ en fonction de δ_L/Ω_1 .

i) Compte tenu de la condition $\Omega_1 \gg \Gamma$ qui entraîne $\epsilon(s) \ll 1$, on remplace les fonctions $\epsilon(s)/[\epsilon^2(s) + f_i^2(s)]$ avec $i = 1, 2$ par $\pi \delta[(s - s_i) f'_i(s_i)] = [\pi / |f'_i(s_i)|] \delta(s - s_i)$. En regroupant, après intégration, les termes relatifs à s_1 et s_2 , montrer que

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi} d_{ab}^2}{\epsilon_0 k u} \frac{1}{\left(s_1 + \frac{3}{s_1} \right)} \left[\frac{s_1 - \frac{1}{s_1}}{1 + \frac{1}{s_1^4}} - \frac{\frac{s_1}{3} - \frac{3}{s_1}}{1 + \left(\frac{s_1}{3} \right)^4} \right] \quad (7.a)$$

En déduire en utilisant les résultats de la question h) que :

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi}}{\varepsilon_0} \frac{d_{ab}^2}{ku} \left[1 - \frac{10 + 16(\delta_L/\Omega_1)^2}{25 + 48(\delta_L/\Omega_1)^2 + 64(\delta_L/\Omega_1)^4} \right] \quad (7.b)$$

j) La formule (7.b) donne la forme de la raie d'absorption saturée à la limite $\Gamma \ll \Omega_1 \ll ku$. Comparer l'absorption au centre ($\delta_L = 0$) et sur les ailes ($|\delta_L| \gg \Omega_1$). Quel est l'ordre de grandeur de la largeur de la raie d'absorption saturée ?

Dans un modèle élémentaire de l'absorption saturée, on considère que les ondes pompe et sonde interagissent, pour $\delta_L = 0$, avec la même classe de vitesse $kv_z = 0$. Dans ces conditions, l'onde sonde traverserait un milieu dans lequel les populations des niveaux a et b seraient égalisées par l'onde pompe. Un tel modèle prévoit donc que $\overline{\alpha''} = 0$ pour $\delta_L = 0$. Ce résultat coïncide-t-il avec celui de la formule (7.b) ? Quelle est l'origine physique de la différence ?

k) On suppose à présent que l'atome subit une relaxation collisionnelle due à des collisions déphasantes. Est-il possible de prévoir simplement comment varie $\overline{\alpha''}$ pour $\delta_L = 0$ en fonction du rapport γ/Γ (où γ est le taux d'amortissement de la cohérence entre les niveaux a et b dû aux collisions) ?

Solution

a) Partons de $\langle d_- \rangle = \text{Tr } \sigma d_-$. En introduisant la relation de fermeture entre σ et d_- , on obtient :

$$\langle d_- \rangle = d_{ab} \sum_{i,j,N,N'} \langle i(N) | \sigma | j(N') \rangle \langle j(N') | \mathcal{S}_- | i(N) \rangle \quad (8)$$

Les seuls éléments de matrice non nuls de \mathcal{S}_- se déduisent des formules (C.4) du chapitre VI et conduisent à :

$$\begin{aligned} \langle d_- \rangle &= d_{ab} \sum_N [\sin \theta \cos \theta (\langle 1(N+1) | \sigma | 1(N) \rangle - \langle 2(N+1) | \sigma | 2(N) \rangle) - \\ &\quad - \sin^2 \theta \langle 2(N+1) | \sigma | 1(N) \rangle + \cos^2 \theta \langle 1(N+1) | \sigma | 2(N) \rangle] \\ &= d_{ab} [\sin \theta \cos \theta (\sigma_{11}^{(-1)} - \sigma_{22}^{(-1)}) - \sin^2 \theta \sigma_{21}^{(-1)} + \cos^2 \theta \sigma_{12}^{(-1)}] \end{aligned} \quad (9)$$

b) Compte tenu des résultats (D.39), (D.40) et (D.21) du chapitre VI, il vient

$$\langle d_- \rangle = d_{ab} \sin \theta \cos \theta \frac{\sin^4 \theta - \cos^4 \theta}{\sin^4 \theta + \cos^4 \theta} e^{-i\omega t} \quad (10)$$

Il suffit alors d'exprimer ces fonctions trigonométriques en fonction de $\sin 2\theta$ et $\cos 2\theta$ puis de $\cotg 2\theta = (\omega_0 - \omega)/\Omega_1$, pour obtenir

$$\langle d_- \rangle = \frac{1}{2} d_{ab} \frac{\Omega_1 (\omega - \omega_0)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{\Omega_1^2}{2}} e^{-i\omega t} \quad (11)$$

(notons qu'un tel résultat coïncide à la limite $\sqrt{\Omega_1^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \gg \Gamma$ avec celui de l'exercice 19).

c) La vitesse de variation de l'opérateur densité σ de l'atome habillé est donnée par la somme de deux types de termes : ceux qui décrivent l'effet du couplage atome-onde intense et de l'émission spontanée et qui ont déjà été étudiés dans le chapitre VI ; ceux qui décrivent le couplage avec l'onde sonde et qui s'écrivent $[V, \sigma]/i\hbar$. A partir de (1) et des formules (C.4), (D.11) et (D.31) du chapitre VI, nous trouvons alors comme équation d'évolution pour $\Delta^{(p)} = \sigma_{22}^{(p)} - \sigma_{11}^{(p)}$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Delta^{(p)} - [ip\omega - \Gamma(\cos^4\theta + \sin^4\theta)] \Delta^{(p)} &= \\ &= -i\Omega'_1 \cos^2\theta [e^{i(\omega't - \varphi')} \sigma_{12}^{(p-1)} - e^{-i(\omega't - \varphi')} \sigma_{21}^{(p+1)}] + \\ &\quad + i\Omega'_1 \sin^2\theta [e^{-i(\omega't - \varphi')} \sigma_{12}^{(p+1)} - e^{i(\omega't - \varphi')} \sigma_{21}^{(p-1)}] + \\ &\quad + \Gamma(\cos^4\theta - \sin^4\theta) e^{ip\omega t} \end{aligned} \quad (12)$$

De même, en utilisant la formule (D.30) du chapitre VI, nous trouvons

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{12}^{(p)} - [i(p\omega - \Omega) - \Gamma_{coh}] \sigma_{12}^{(p)} &= -i \frac{\Omega'_1}{2} \cos^2\theta e^{-i(\omega't - \varphi')} \Delta^{(p+1)} + \\ &\quad + i \frac{\Omega'_1}{2} \sin^2\theta e^{i(\omega't - \varphi')} \Delta^{(p-1)} \end{aligned} \quad (13.a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{21}^{(p)} - [i(p\omega + \Omega) - \Gamma_{coh}] \sigma_{21}^{(p)} &= i \frac{\Omega'_1}{2} \cos^2\theta e^{i(\omega't - \varphi')} \Delta^{(p-1)} - \\ &\quad - i \frac{\Omega'_1}{2} \sin^2\theta e^{-i(\omega't - \varphi')} \Delta^{(p+1)} \end{aligned} \quad (13.b)$$

La solution de ces équations à l'ordre 0 en Ω'_1 est, en régime quasi stationnaire, déduite des équations (D.21), (D.39) et (D.40) du chapitre VI :

$$\Delta^{(p)} = \frac{\cos^4\theta - \sin^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta} e^{ip\omega t} \quad (14.a)$$

$$\sigma_{12}^{(p)} = \sigma_{21}^{(p)} = 0 \quad (14.b)$$

d) Pour trouver la solution à l'ordre 1 en Ω'_1 , il suffit de remplacer dans les seconds membres des équations (12), (13.a) et (13.b) $\Delta^{(p)}$, $\sigma_{12}^{(p)}$ et $\sigma_{21}^{(p)}$ par leurs solutions à l'ordre 0 données en (14.a) et (14.b) (dans l'équation (12), on omet également le dernier terme, proportionnel à $(\cos^4\theta - \sin^4\theta)$, qui est un terme source pour les termes d'ordre 0). On trouve ainsi immédiatement que le terme linéaire en Ω'_1 dans le développement de $\Delta^{(p)}$ en puissances de Ω'_1 est nul.

Considérons à présent (13.a). Pour obtenir une évolution en $e^{-i(\omega't - \varphi')}$, il faut prendre $p = -1$ et ne retenir du second membre que le premier terme qui est approximé par $-i(\Omega'_1/2)\cos^2\theta \Delta^{(0)} \exp[-i(\omega't - \varphi')]$. En utilisant (14.a) avec $p = 0$, on trouve ainsi :

$$\sigma_{12}^{(-1)} = -i \frac{\Omega'_1}{2} \cos^2\theta \frac{\cos^4\theta - \sin^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta} \frac{e^{-i(\omega't - \varphi')}}{\Gamma_{coh} + i[\Omega + (\omega - \omega')]} \quad (15)$$

De façon identique, la solution de (13.b) évoluant en $e^{-i(\omega't - \varphi')}$ est

$$\sigma_{21}^{(-1)} = -i \frac{\Omega'_1}{2} \sin^2\theta \frac{\cos^4\theta - \sin^4\theta}{\cos^4\theta + \sin^4\theta} \frac{e^{-i(\omega't - \varphi')}}{\Gamma_{coh} - i[\Omega + (\omega' - \omega)]} \quad (16)$$

e) Le report de (15) et (16) dans (9) donne :

$$\langle d_- \rangle = -i d_{ab} \frac{\Omega'_1}{2} e^{-i(\omega' t - \phi)} \frac{\cos^4 \theta - \sin^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} \times \\ \times \left[\frac{\cos^4 \theta}{\Gamma_{coh} + i(\Omega + \omega - \omega')} - \frac{\sin^4 \theta}{\Gamma_{coh} - i(\Omega + \omega' - \omega)} \right] \quad (17)$$

L'utilisation de (2) et la définition $\Omega'_1 = -d_{ab}\delta'/\hbar$, conduisent alors à

$$\alpha'' = \frac{|d_{ab}|^2}{\epsilon_0} \frac{\cos^4 \theta - \sin^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} \Gamma_{coh} \left[\frac{\cos^4 \theta}{\Gamma_{coh}^2 + (\Omega + \omega - \omega')^2} - \frac{\sin^4 \theta}{\Gamma_{coh}^2 + (\Omega + \omega' - \omega)^2} \right] \quad (18)$$

Supposons pour fixer les idées $\cos^4 \theta > \sin^4 \theta$ (ce qui correspond à $\delta_L < 0$). Dans ce cas, la résonance se produisant en $\omega' = \omega + \Omega$ est associée à un processus d'atténuation (α'' est positif) alors que la résonance se produisant en $\omega' = \omega - \Omega$ est associée à une amplification (α'' est négatif). La largeur à mi-hauteur de chacune de ces résonances est $2\Gamma_{coh}$. L'amplification est plus petite que l'atténuation par un facteur $\operatorname{tg}^2 \theta = (\Omega - \omega_0 + \omega)^2 / (\Omega + \omega_0 - \omega)^2$. L'interprétation physique de ces résonances et de leur signe (atténuation ou amplification du faisceau sonde) est donnée dans le paragraphe E-2-b du chapitre VI.

f) D'après (3.a) et (3.b), le second terme de (18) est résonnant pour la classe de vitesse v_1 telle que

$$2kv_1 = \sqrt{\Omega_1^2 + (\delta_L + kv_1)^2} \quad (19.a)$$

De même, le premier terme de (18) est résonnant lorsque

$$2kv_2 = -\sqrt{\Omega_1^2 + (\delta_L + kv_2)^2} \quad (19.b)$$

En élévant au carré les expressions (19.a) et (19.b), nous constatons que kv_1 et kv_2 sont solutions d'une même équation du second degré et valent :

$$kv_1 = \frac{\delta_L + \sqrt{3\Omega_1^2 + 4\delta_L^2}}{3} \quad (20.a)$$

$$kv_2 = \frac{\delta_L - \sqrt{3\Omega_1^2 + 4\delta_L^2}}{3} \quad (20.b)$$

Comme δ_L et Ω_1 sont tous deux petits devant ku , les équations (20) entraînent que $|v_1| \ll u$ et $|v_2| \ll u$. Il s'ensuit que les classes de vitesse qui contribuent de façon importante à (4) sont telles que l'exponentielle de Boltzmann peut être remplacée par 1.

Remarque

Les classes de vitesse qui interagissent de façon résonante avec l'onde sonde peuvent être aussi déterminées par une méthode graphique. Considérons tout d'abord la fréquence apparente du laser pompe pour un atome de vitesse v_r . Cette fréquence est égale d'après (3.a) à $\omega_L + kv_r$. Ses variations avec kv_r pour δ_L fixé sont celles d'une droite de pente 1, représentée par la droite en traits tiretés de la figure 1. De même, la fréquence apparente du laser sonde, qui est égale d'après (3.b) à $\omega_L - kv_r$, est représentée par la droite en traits tiretés de pente -1, qui coupe la première droite au point I d'abscisse 0 et d'ordonnée

ω_L . Pour chaque valeur de kv_z , le spectre d'absorption de l'atome dans son référentiel au repos comporte, d'après l'étude de la partie A, deux raies centrées aux fréquences des bandes latérales $\omega \pm [(\omega - \omega_0)^2 + \Omega_1^2]^{1/2}$ qui valent d'après (3.a)

$$\omega_L + kv_z + \sqrt{\Omega_1^2 + (\omega_L - \omega_0 + kv_z)^2} \quad (21.a)$$

$$\omega_L + kv_z - \sqrt{\Omega_1^2 + (\omega_L - \omega_0 + kv_z)^2} \quad (21.b)$$

Les variations de ces deux fréquences avec kv_z pour δ_L fixé sont représentées par les deux branches de l'hyperbole tracée en traits pleins sur la figure 1 et dont l'une des asymptotes est l'horizontale d'ordonnée ω_0 . Pour δ_L fixé, les classes de vitesses kv_1 et kv_2 résonnantes avec l'onde sonde, c'est-à-dire susceptibles d'absorber (ou d'amplifier) cette onde sont données par les abscisses des intersections M_1 et M_2 de cette hyperbole avec la droite de pente -1 .

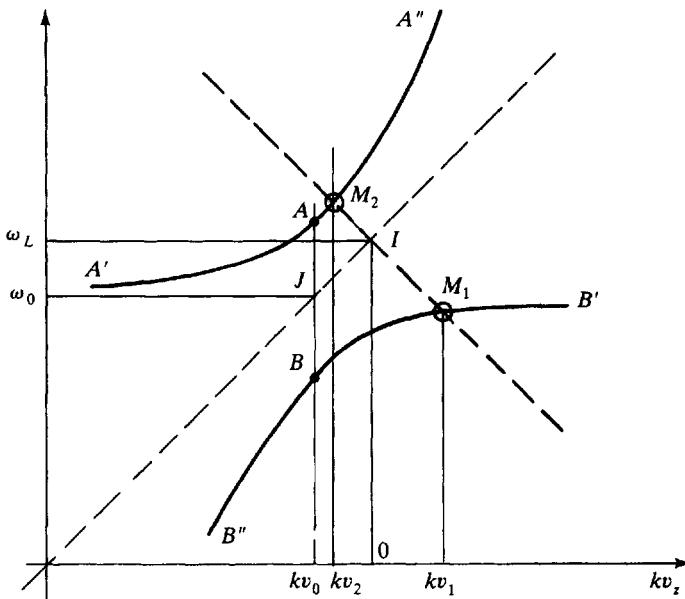


Figure 1. Détermination graphique des classes de vitesse résonnantes avec l'onde sonde.

Pour déterminer si ces classes de vitesse absorbent ou amplifient l'onde sonde, introduisons la classe de vitesse $kv_0 = \omega_0 - \omega_L$ pour laquelle l'onde pompe est résonnante. La verticale d'abscisse kv_0 coupe l'hyperbole aux points A et B d'ordonnées $\omega_0 + \Omega_1$ et $\omega_0 - \Omega_1$ (le milieu J de AB , d'ordonnée ω_0 , est le centre de l'hyperbole). Pour $v < v_0$, la fréquence apparente du laser est inférieure à ω_0 . La branche $A'A$ de l'hyperbole, qui correspond à la bande latérale supérieure est alors absorbante, alors que la branche $B''B$ est amplifiante (voir la discussion ci-dessus après la formule (18) et la discussion du paragraphe E-2-b du chapitre VI).

Pour $v > v_0$, ces conclusions sont inversées : la branche BB' est absorbante alors que la branche AA'' est amplifiante. On en conclut que, pour la valeur de δ_L choisie pour la figure 1, la classe de vitesse kv_1 est absorbante alors que la classe de vitesse kv_2 est amplifiante. Pour d'autres situations, par exemple $\omega_L - \omega_0 = 0$, auquel cas $v_0 = 0$, les deux classes de vitesse résonnantes sont toutes deux sur des branches absorbantes.

g) A partir de (3.a), on déduit que

$$\cot g 2\theta = \frac{1-s^2}{2s} = -\frac{\delta_L + kv_z}{\Omega_1} \quad (22)$$

et par suite

$$kv_z = -\Omega_1 \left[\frac{\delta_L}{\Omega_1} + \frac{1-s^2}{2s} \right] \quad (23)$$

Cette relation permet d'obtenir par différentiation

$$dv_z = \frac{\Omega_1}{2k} \frac{1+s^2}{s^2} ds \quad (24)$$

Dans l'expression (18) donnant α'' , remplaçons $\cos^2\theta$ par $1/(1+s^2)$ et $\sin^2\theta$ par $s^2/(1+s^2)$. Procédons de même pour Γ_{coh} en utilisant l'équation (D.27) du chapitre VI

$$\Gamma_{coh} = \Gamma \left[\frac{1}{2} + \frac{s^2}{(1+s^2)^2} \right] = \Omega_1 e(s) \quad (25)$$

Les dénominateurs des fractions apparaissant dans (18) sont respectivement de la forme $\Gamma_{coh}^2 + [\sqrt{\Omega_1^2 + (\delta_L + kv_z)^2} \pm 2kv_z]^2$. La valeur de kv_z est donnée en (23). Par ailleurs, $\sqrt{\Omega_1^2 + (\delta_L + kv_z)^2}$ est égal à :

$$\sqrt{\Omega_1^2 + (\delta_L + kv_z)^2} = \frac{\Omega_1}{2s} (1+s^2) \quad (26)$$

En utilisant (4), (18), (23), (24), (25) et (26), on retrouve la formule (5) de l'énoncé.

h) La fonction $f_1(s)$ s'annule pour

$$s_1 = \frac{2\delta_L}{\Omega_1} + \sqrt{4 \frac{\delta_L^2}{\Omega_1^2} + 3} \quad (27)$$

l'autre racine négative étant en dehors du domaine d'intégration de (5). De même, la seule racine positive de $f_2(s)$ est

$$s_2 = \frac{1}{3} \left[\frac{2\delta_L}{\Omega_1} + \sqrt{\frac{4\delta_L^2}{\Omega_1^2} + 3} \right] = \frac{s_1}{3} \quad (28)$$

Partons de

$$\frac{s_1}{3} - \frac{1}{s_1} = \frac{1}{3} \left(\frac{s_1^2 - 3}{s_1} \right) \quad (29)$$

et utilisons le fait que $f_1(s_1) = 0$. D'après (6.a), nous obtenons

$$\frac{s_1}{3} - \frac{1}{s_1} = -\frac{4}{3} \frac{\delta_L}{\Omega_1} \quad (30)$$

En éllevant les deux membres de cette équation au carré, nous trouvons

$$\left(\frac{s_1}{3}\right)^2 + \frac{1}{s_1^2} = \frac{16}{9} \frac{\delta_L^2}{\Omega_1^2} + \frac{2}{3} \quad (31)$$

et de même en éllevant une nouvelle fois au carré

$$\left(\frac{s_1}{3}\right)^4 + \frac{1}{s_1^4} = \frac{256}{81} \frac{\delta_L^4}{\Omega_1^4} + \frac{64}{27} \frac{\delta_L^2}{\Omega_1^2} + \frac{2}{9} \quad (32)$$

i) D'après (6.a) et (6.b)

$$\frac{1}{|f'_1(s_1)|} = \frac{2s_1^2}{3 + s_1^2} \quad (33.a)$$

$$\frac{1}{|f'_2(s_2)|} = \frac{2s_2^2}{1 + 3s_2^2} \quad (33.b)$$

L'intégrale de (5) donne alors

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi} d_{ab}^2}{\epsilon_0 k u} \left[-\frac{(1 - s_1^2) s_1^4}{(3 + s_1^2)(1 + s_1^2)} + \frac{1 - s_2^2}{(1 + 3s_2^2)(1 + s_2^2)} \right] \quad (34.a)$$

En utilisant $s_2 = s_1/3$, on transforme (34.a) en (7.a). La réduction au même dénominateur de (7.a) donne

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi} d_{ab}^2}{\epsilon_0 k u} \frac{1}{\left[s_1 + \frac{3}{s_1}\right]} \frac{\left\{ \left(\frac{s_1}{3}\right)^4 + \left(\frac{1}{s_1}\right)^4 - \frac{4}{9} \left[\left(\frac{s_1}{3}\right)^2 + \frac{1}{s_1^2} \right] + \frac{22}{27} \right\} \left[s_1 + \frac{3}{s_1}\right]}{\frac{82}{81} + \left(\frac{s_1}{3}\right)^4 + \left(\frac{1}{s_1}\right)^4} \quad (34.b)$$

En simplifiant par $s_1 + (3/s_1)$ et en utilisant (31) et (32) nous trouvons (7.b).

j) La courbe donnant $\overline{\alpha''}$ en fonction de δ_L présente un minimum en $\delta_L = 0$, a une largeur de l'ordre de Ω_1 et tend vers une limite égale à $\sqrt{\pi} |d_{ab}|^2 / \epsilon_0 k u$ lorsque $|\delta_L| \gg \Omega_1$. Cette limite correspond d'ailleurs à l'absorption linéaire pour le faisceau sonde seul. Il convient de noter que la largeur de cette courbe est plus petite que $k u$ ce qui montre qu'il est possible de faire de la spectroscopie sans effet Doppler en utilisant l'absorption saturée (*).

La valeur de $\overline{\alpha''}$ en $\delta_L = 0$ est égale à 0.6 fois sa valeur asymptotique. Ceci montre que le milieu n'est jamais totalement transparent pour le faisceau sonde contrairement aux prévisions du modèle élémentaire décrit dans l'énoncé de la question j). En fait, lorsque $\delta_L = 0$, les classes de vitesse interagissant de façon résonnante avec le faisceau sonde sont, d'après (20.a) et (20.b), $kv_1 = \Omega_1/\sqrt{3}$ et $kv_2 = -\Omega_1/\sqrt{3}$. Or, pour ces classes de vitesse, la différence de population $\pi_2'' - \pi_1''$ entre deux niveaux d'une même multiplicité

(*) Pour plus de détails sur la spectroscopie d'absorption saturée, voir par exemple T.W. Hänisch dans Nonlinear Spectroscopy (Proc. Int. School Phys. Enrico Fermi, Course LXIV), N. Bloembergen ed., p. 17 North Holland 1977 ; Lethokov and Chebotayev (chapitre 3).

de l'atome habillé est très différente de 0. Plus précisément, s_1 et s_2 valent, d'après (27) et (28), $\sqrt{3}$ et $1/\sqrt{3}$ lorsque $\delta_L = 0$, $|\pi''_2 - \pi''_1|$ est égal, d'après la formule (D.21) du chapitre VI, à $4/\Gamma$. L'onde sonde interagit donc avec des classes de vitesse pour lesquelles les populations des niveaux habillés ne sont pas égalisées.

k) En présence de relaxation collisionnelle, la différence de population entre les niveaux habillés se déduit des formules (36) et (18) du complément B_{VI} applicables à la limite d'impact.

$$\pi''_1 - \pi''_2 = \frac{\sin^4 \theta - \cos^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta + 4 \frac{\gamma}{\Gamma} \sin^2 \theta \cos^2 \theta} \quad (35)$$

Pour obtenir la forme de la raie d'absorption saturée, il faut donc remplacer dans la formule (5) $1/(1+s^4)$ par

$$\frac{1}{1+s^4 + 4 \frac{\gamma}{\Gamma} s^2} \quad (36)$$

Il faut également remplacer $\varepsilon(s)$ par

$$\varepsilon'(s) = \frac{\Gamma}{\Omega_1} \left[\frac{1}{2} + \frac{s^2}{(1+s^2)^2} \right] + \frac{\gamma}{\Omega_1} \left[\frac{1+s^4}{(1+s^2)^2} \right] \quad (37)$$

(voir complément B_{VI} , formule (20.a)).

Dans la mesure où le taux de relaxation γ reste petit devant ku , on peut remplacer comme précédemment les fonctions $\varepsilon'(s)/[\varepsilon'^2(s) + f_i^2(s)]$ par des fonctions de Dirac et obtenir ainsi

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi} |d_{ab}|^2}{\varepsilon_0 k u} \left[-\frac{(1-s_1^2)s_1^4}{(3+s_1^2)(1+s_1^4+4\frac{\gamma}{\Gamma}s_1^2)} + \frac{(1-s_2^2)}{(1+3s_2^2)(1+s_2^4+4\frac{\gamma}{\Gamma}s_2^2)} \right] \quad (38)$$

au lieu de (34.a).

Pour trouver le comportement en $\delta_L = 0$, remplaçons s_1 par $\sqrt{3}$ et s_2 par $1/\sqrt{3}$ dans (38) ; on obtient

$$\overline{\alpha''} = \frac{\sqrt{\pi} |d_{ab}|^2}{\varepsilon_0 k u} \frac{3}{5 + 6 \frac{\gamma}{\Gamma}} \quad (39)$$

Quand le taux de collision croît, $\overline{\alpha''}$ diminue et tend vers 0. Cela est dû au fait que les collisions tendent à égaliser les populations des niveaux habillés. Il s'ensuit que le milieu devient de plus en plus transparent pour le faisceau sonde.

On peut alors se demander si l'image élémentaire présentée dans l'énoncé de la question j) (qui prédit effectivement $\overline{\alpha''} = 0$ pour $\delta_L = 0$) est mieux justifiée lorsque $\gamma \gg \Gamma$. En fait, cette image est associée à une description de l'atome uniquement en termes des populations σ_{aa} et σ_{bb} des niveaux atomiques a et b . Or, d'après les équations de Bloch optiques, une telle image est généralement fausse parce qu'elle néglige les effets liés à la cohérence optique σ_{ab} . Cependant, lorsque γ croît, cette cohérence optique est de plus en plus amortie et il peut être justifié de raisonner uniquement en termes des populations σ_{aa} et σ_{bb} (voir exercice 18). Il ne faut cependant pas perdre de vue que les classes de vitesse qui interagissent effectivement avec le faisceau sonde restent déterminées par le diagramme d'énergie de l'atome habillé (voir figure 1 et équations (20)) et sont indépendantes de γ .

APPENDICE

RÉSUMÉ SUR L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE EN JAUGE DE COULOMB

Cet appendice rappelle brièvement la procédure de quantification du champ électromagnétique en jauge de Coulomb et rassemble les formules essentielles qui sont utilisées dans cet ouvrage (*).

Le système étudié en électrodynamique est formé de deux sous-systèmes en interaction : le champ électromagnétique d'une part, un ensemble de particules chargées d'autre part. L'électrodynamique quantique cherche à décrire, dans le cadre de la mécanique quantique, les états et la dynamique de ces deux sous-systèmes dont les évolutions sont couplées. Les particules chargées sont en effet les sources du champ et le champ exerce des forces sur les particules.

Nous commençons par rappeler les variables utilisées, en théories classique et quantique, pour décrire le champ (§ 1) et les particules (§ 2). Puis, nous introduisons l'hamiltonien en jauge de Coulomb qui permet d'étudier la dynamique du système global (§ 3). Nous passons ensuite en revue quelques états quantiques importants du champ (§ 4) et nous introduisons enfin le point de vue dipolaire électrique utilisé couramment pour décrire des systèmes localisés de charges comme des atomes ou des molécules (§ 5).

1. Description du champ électromagnétique

a) CHAMPS ÉLECTRIQUE \mathbf{E} ET MAGNÉTIQUE \mathbf{B}

En électrodynamique classique, les champs $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$ obéissent aux équations de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r},t) \quad (1.a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0 \quad (1.b)$$

(*) Il n'est pas question ici d'aborder tous les aspects de la quantification du champ électromagnétique ni de démontrer tous les résultats qui seront cités. Le lecteur intéressé pourra se reporter à « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique ».

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r},t) \quad (1.c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r},t) \quad (1.d)$$

où les densités de charge $\rho(\mathbf{r},t)$ et de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ sont celles associées aux particules. Après une transformation de Fourier spatiale, les équations de Maxwell deviennent (*)

$$i\mathbf{k} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{k},t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{k},t) \quad (2.a)$$

$$i\mathbf{k} \cdot \mathcal{B}(\mathbf{k},t) = 0 \quad (2.b)$$

$$i\mathbf{k} \times \mathcal{E}(\mathbf{k},t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{B}(\mathbf{k},t) \quad (2.c)$$

$$i\mathbf{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k},t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k},t)}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{k},t) \quad (2.d)$$

où $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ et $\mathcal{E}(\mathbf{k},t)$, par exemple, sont reliés par :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \mathcal{E}(\mathbf{k},t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3)$$

Les deux équations (2.a) et (2.b) fixent les parties longitudinales $\mathcal{E}_{||}$ et $\mathcal{B}_{||}$ des champs électrique et magnétique, c'est-à-dire les projections sur \mathbf{k}/k de \mathcal{E} et \mathcal{B} :

$$\mathcal{E}_{||}(\mathbf{k},t) = -\frac{i\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} \rho(\mathbf{k},t) \quad (4.a)$$

$$\mathcal{B}_{||}(\mathbf{k},t) = \mathbf{0} \quad (4.b)$$

Ces relations deviennent dans l'espace réel

$$\mathbf{E}_{||}(\mathbf{r},t) = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \rho(\mathbf{r}',t) \nabla_{\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (5.a)$$

$$\mathbf{B}_{||}(\mathbf{r},t) = \mathbf{0} \quad (5.b)$$

Le champ magnétique est purement transverse alors que le champ électrique longitudinal coïncide avec le champ de Coulomb associé à la distribution de charge $\rho(\mathbf{r},t)$ au même instant. Les champs longitudinaux ne sont donc pas réellement des variables indépendantes pour le champ. En effet, ils sont soit nuls, soit exprimables via ρ en fonction des variables des particules. Par contre, les champs transverses \mathcal{E}_{\perp} et

(*) Nous utilisons systématiquement la convention suivante : un champ scalaire ou vectoriel dans l'espace réel est noté avec une lettre ordinaire, alors que sa transformée de Fourier spatiale est désignée par la même lettre cursive ou italique.

$\mathcal{B}_\perp = \mathcal{B}$, qui sont les projections de \mathcal{E} et \mathcal{B} dans le plan perpendiculaire à \mathbf{k} , sont des variables indépendantes dont les équations du mouvement se déduisent de (2.c) et (2.d)

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{B}(\mathbf{k},t) = -i\mathbf{k} \times \mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t) \quad (6.a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t) = c^2 i \mathbf{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k},t) - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{j}_\perp(\mathbf{k},t) \quad (6.b)$$

b) POTENTIELS VECTEUR \mathbf{A} ET SCALAIRES U

En théorie quantique, il est nécessaire de considérer les potentiels \mathbf{A} et U reliés aux champs \mathbf{E} et \mathbf{B} par les équations

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\nabla U(\mathbf{r},t) - \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} \quad (7.a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r},t) \quad (7.b)$$

qui deviennent dans l'espace réciproque

$$\mathcal{E}(\mathbf{k},t) = -i\mathbf{k} \cdot \mathcal{U}(\mathbf{k},t) - \frac{\partial \mathcal{A}(\mathbf{k},t)}{\partial t} \quad (8.a)$$

$$\mathcal{B}(\mathbf{k},t) = i\mathbf{k} \times \mathcal{A}(\mathbf{k},t) \quad (8.b)$$

Les champs \mathbf{E} et \mathbf{B} sont invariants dans la transformation de jauge associée à la fonction $F(\mathbf{r},t)$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \nabla F(\mathbf{r},t) \quad (9.a)$$

$$U(\mathbf{r},t) \rightarrow U'(\mathbf{r},t) = U(\mathbf{r},t) - \frac{\partial F(\mathbf{r},t)}{\partial t} \quad (9.b)$$

qui peut encore s'écrire

$$\mathcal{A}(\mathbf{k},t) \rightarrow \mathcal{A}'(\mathbf{k},t) = \mathcal{A}(\mathbf{k},t) + i\mathbf{k} \cdot \mathcal{F}(\mathbf{k},t) \quad (10.a)$$

$$\mathcal{U}(\mathbf{k},t) \rightarrow \mathcal{U}'(\mathbf{k},t) = \mathcal{U}(\mathbf{k},t) - \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{k},t)}{\partial t} \quad (10.b)$$

Il apparaît clairement sur les équations (10) que seuls $\mathcal{A}_{||}$ et \mathcal{U} changent dans une transformation de jauge alors que \mathcal{A}_\perp est invariant de jauge

$$\mathcal{A}'_\perp(\mathbf{k},t) = \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t) \quad (11)$$

Par ailleurs, les équations (8) montrent que les champs transverses \mathcal{E}_\perp et \mathcal{B} ne dépendent que de \mathcal{A}_\perp

$$\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t) \quad (12.a)$$

$$\mathcal{B}(\mathbf{k},t) = i\mathbf{k} \times \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t) \quad (12.b)$$

c) JAUGE DE COULOMB

La jauge de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) correspond au choix

$$\mathcal{A}_{||}(\mathbf{k},t) = \mathbf{0} = \mathbf{A}_{||}(\mathbf{r},t) \quad (13)$$

En comparant la partie longitudinale de (8.a) avec (4.a), on obtient alors

$$\mathcal{U}(\mathbf{k},t) = \frac{1}{\epsilon_0 k^2} \rho(\mathbf{k},t) \quad (14)$$

c'est-à-dire encore

$$U(\mathbf{r},t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 r' \frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (15)$$

En jauge de Coulomb, le potentiel vecteur longitudinal est nul et le potentiel scalaire coïncide avec le potentiel de Coulomb associé à la distribution de charges $\rho(\mathbf{r},t)$ au même instant. Les variables indépendantes du champ sont donc dans cette jauge le potentiel vecteur transverse $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t)$ et sa vitesse $\dot{\mathcal{A}}_\perp(\mathbf{k},t) = -\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t)$.

d) VARIABLES NORMALES

La forme simple des équations du mouvement (6) des champs transverses suggère d'introduire la combinaison linéaire suivante de \mathcal{B} et \mathcal{E}_\perp (ou, d'après (12), de \mathcal{A}_\perp et $\dot{\mathcal{A}}_\perp$)

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{k},t) &= \lambda(k) \left[\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t) - c \frac{\mathbf{k}}{k} \times \mathcal{B}(\mathbf{k},t) \right] \\ &= \lambda(k) [-\dot{\mathcal{A}}_\perp(\mathbf{k},t) + i\omega \mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t)] \end{aligned} \quad (16)$$

où $\lambda(k)$ est une constante de normalisation que nous serons amenés plus loin à prendre égale à $-i\sqrt{\epsilon_0/2\hbar\omega}$. L'équation d'évolution de α est alors très simple :

$$\dot{\alpha}(\mathbf{k},t) + i\omega \alpha(\mathbf{k},t) = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega}} j_\perp(\mathbf{k},t) \quad (17)$$

En l'absence de sources ($j_\perp = \mathbf{0}$), les variables $\alpha(\mathbf{k},t)$ correspondant aux diverses valeurs possibles de \mathbf{k} évoluent indépendamment les unes des autres, en $\exp(-i\omega t)$ où $\omega = ck$. Les variables α décrivent donc les modes normaux de vibration du champ libre et sont appelées pour cette raison variables normales.

L'équation (16) montre que α est, comme \mathcal{E}_\perp et \mathcal{B} , un champ transverse. Pour chaque valeur de \mathbf{k} , on peut introduire deux vecteurs

unitaires ϵ et ϵ' , orthogonaux entre eux et tous deux perpendiculaires à \mathbf{k} . Chaque ensemble \mathbf{k}, ϵ définit un mode normal de vibration du champ et la variable normale associée à ce mode

$$\alpha_\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon \cdot \alpha(\mathbf{k}) \quad (18.a)$$

obéit, d'après (17), à l'équation d'évolution

$$\dot{\alpha}_\epsilon(\mathbf{k},t) + i\omega \alpha_\epsilon(\mathbf{k},t) = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega}} \epsilon \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k},t) \quad (18.b)$$

En utilisant les conditions de réalité des champs $\mathbf{E}_\perp, \mathbf{B}, \mathbf{A}_\perp$, qui s'écrivent par exemple pour \mathbf{E}_\perp

$$\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t) = \mathcal{E}_\perp^*(-\mathbf{k},t), \quad (19)$$

on peut inverser les équations (16) et exprimer $\mathcal{E}_\perp(\mathbf{k},t)$, $\mathcal{B}(\mathbf{k},t)$, $\mathcal{A}_\perp(\mathbf{k},t)$ en fonction de $\alpha_\epsilon(\mathbf{k},t)$ et $\alpha_\epsilon^*(-\mathbf{k},t)$. Une transformation de Fourier donne alors les développements en variables normales des divers champs transverses. Ces développements sont écrits plus loin directement en fonction des opérateurs $a_\epsilon(\mathbf{k})$ et $a_\epsilon^*(\mathbf{k})$ qui sont associés, en théorie quantique, aux variables normales $\alpha_\epsilon(\mathbf{k})$ et $\alpha_\epsilon^*(\mathbf{k})$. Il est courant de désigner par « rayonnement » l'ensemble des degrés de liberté associés au champ transverse. L'état du rayonnement est donc défini à l'instant t par la donnée des variables normales $\alpha_\epsilon(\mathbf{k},t)$ pour tout \mathbf{k} et tout ϵ .

e) PRINCIPE DE LA QUANTIFICATION CANONIQUE EN JAUGE DE COULOMB

La procédure de quantification canonique nécessite d'identifier les couples de variables dynamiques conjuguées (coordonnées et impulsions) qui deviennent, après quantification, des opérateurs dont le commutateur vaut $i\hbar$.

Pour le champ électromagnétique, on peut introduire un lagrangien qui ne contient que les variables réellement indépendantes du champ (\mathcal{A}_\perp et \mathcal{A}_\perp) et celles des particules (lagrangien standard en jauge de Coulomb) et qui conduit aux équations de Maxwell pour les champs et aux équations de Newton-Lorentz pour les particules. Vis-à-vis de ce lagrangien, le moment conjugué de la coordonnée généralisée $\mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k})$ se trouve être égal à $\pi_\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k})$ et les relations de commutation canoniques s'écrivent

$$[\mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k}), \pi_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}')] = i\hbar \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (20.a)$$

L'opérateur $a_\epsilon(\mathbf{k})$ associé à la variable normale $\alpha_\epsilon(\mathbf{k})$ s'exprime en fonction des opérateurs $\mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k})$ et $\pi_\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \mathcal{A}_\epsilon(\mathbf{k})$ par une équation

analogue à (16). En choisissant convenablement la constante de normalisation $\lambda(k)$ ($\lambda(k) = -i\sqrt{\epsilon_0/2\hbar\omega}$), on trouve alors que la relation (20.a) est équivalente à

$$[a_\epsilon(\mathbf{k}), a_{\epsilon'}^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (20.b)$$

tous les autres commutateurs étant nuls.

Pour suivre les calculs d'électrodynamique quantique présentés dans cet ouvrage, il suffit en fait de retenir de ce qui précède les relations de commutation (20.b) et les expressions des grandeurs physiques en fonction des opérateurs a et a^+ qui sont discutées dans la suite de cet appendice.

f) LES CHAMPS QUANTIQUES EN JAUGE DE COULOMB

Comme nous l'avons déjà expliqué plus haut, il est possible d'inverser les équations (16) entre opérateurs et d'utiliser les conditions d'hermiticité de ces opérateurs pour obtenir, par transformation de Fourier, les développements des opérateurs champs en a_ϵ et a_ϵ^+ . On trouve ainsi que

$$\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_\epsilon \mathcal{A}_\omega [\epsilon a_\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \epsilon a_\epsilon^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (21)$$

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_\epsilon i\mathcal{E}_\omega [\epsilon a_\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \epsilon a_\epsilon^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (22)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \int d^3k \sum_\epsilon i\mathcal{B}_\omega [(\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}) a_\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon}) a_\epsilon^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (23)$$

où

$$\omega = ck \quad (24.a)$$

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k \quad (24.b)$$

$$\mathcal{A}_\omega = [\hbar/2\epsilon_0\omega(2\pi)^3]^{\frac{1}{2}} ; \quad \mathcal{E}_\omega = \omega \mathcal{A}_\omega ; \quad \mathcal{B}_\omega = \mathcal{E}_\omega/c \quad (24.c)$$

Quant au champ électrique total $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, il s'écrit

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{||}(\mathbf{r}) \quad (24.d)$$

où $\mathbf{E}_{||}(\mathbf{r})$ est donné en (5.a).

Il est souvent commode de considérer que le champ est contenu dans une boîte cubique avec des conditions aux limites périodiques. La dimension L de cette boîte est choisie grande devant toutes les dimensions caractéristiques du problème étudié. Les composantes des vecteurs d'onde sont alors des multiples de $2\pi/L$, et les modes forment

un ensemble discret repéré par l'indice j . Les intégrales de Fourier sont remplacées par des séries suivant la règle

$$\int d^3k \sum_{\epsilon} f(\mathbf{k}, \epsilon) \leftrightarrow \sum_j \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 f(\mathbf{k}_j, \epsilon_j) \quad (25)$$

Les opérateurs création et annihilation sont redéfinis par

$$a_j = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^{3/2} \int_{C_j} d^3k a_{\epsilon_j}(\mathbf{k}) \quad (26)$$

où C_j est la cellule élémentaire de volume $(2\pi/L)^3$ autour de \mathbf{k}_j . Les a_i et a_i^+ vérifient la relation de commutation simple

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad (27)$$

Les champs s'expriment en fonction des a_j sous la forme :

$$\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) = \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_j L^3}} [a_j \epsilon_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} + a_j^+ \epsilon_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}] \quad (28)$$

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = \sum_j i \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2\epsilon_0 L^3}} [a_j \epsilon_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - a_j^+ \epsilon_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}] \quad (29)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{i}{c} \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2\epsilon_0 L^3}} [a_j \boldsymbol{\kappa}_j \times \boldsymbol{\epsilon}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - a_j^+ \boldsymbol{\kappa}_j \times \boldsymbol{\epsilon}_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}]. \quad (30)$$

Donnons pour terminer ce paragraphe quelques formules utiles. Dans les expressions bilinéaires vis à vis des champs, on est souvent amené à utiliser les sommes suivantes des composantes cartésiennes des vecteurs polarisation transverses $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\epsilon}'$, perpendiculaires à \mathbf{k} :

$$\sum_{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}_l \boldsymbol{\epsilon}_m = \delta_{lm} - \boldsymbol{\kappa}_l \cdot \boldsymbol{\kappa}_m \quad (31)$$

$$\sum_{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}_l (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon})_m = \sum_n e_{lmn} \boldsymbol{\kappa}_n \quad (32)$$

$$\sum_{\epsilon} (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon})_l (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon})_m = \delta_{lm} - \boldsymbol{\kappa}_l \cdot \boldsymbol{\kappa}_m \quad (33)$$

où $l, m = x, y, z$, e_{lmn} est le tenseur antisymétrique et où $\boldsymbol{\kappa}$ est défini en (24.b). L'expression (31) représente, dans l'espace réciproque, le

projecteur sur le sous-espace des champs transverses. Dans l'espace réel, ce projecteur est représenté par la fonction delta transverse :

$$\begin{aligned}\delta_{lm}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} (\delta_{lm} - \kappa_l \kappa_m) \\ &= \frac{2}{3} \delta_{lm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{Y(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5} \times \\ &\quad \times [3(r_l - r'_l)(r_m - r'_m) - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \delta_{lm}] \quad (34)\end{aligned}$$

où $Y(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est une fonction de régularisation égale à 1 partout, sauf dans une petite sphère autour de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0$ où elle tend vers zéro. Enfin, à partir (27), (28) et (29), on obtient les relations de commutation suivantes pour les champs dans l'espace réel

$$[A_{\perp l}(\mathbf{r}), A_{\perp m}(\mathbf{r}')] = 0 \quad ; \quad [E_{\perp l}(\mathbf{r}), E_{\perp m}(\mathbf{r}')] = 0 \quad (35.a)$$

$$[A_{\perp l}(\mathbf{r}), E_{\perp m}(\mathbf{r}')] = \frac{-i\hbar}{\epsilon_0} \delta_{lm}^{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (35.b)$$

2. Les particules

Les particules sont décrites dans le cadre de l'approximation non relativiste : leur vitesse est supposée petite par rapport à c , et leur nombre est invariable. Dans cette limite, on peut faire l'économie d'une description de la matière par une théorie de champ, et se contenter de la description usuelle reposant sur les variables conjuguées \mathbf{r}_α (position) et \mathbf{p}_α (impulsion), α repérant la particule. En théorie quantique, ces variables deviennent des observables obéissant aux relations de commutation canoniques :

$$[r_{\alpha i}, p_{\beta j}] = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \quad (36)$$

En présence du potentiel vecteur, la vitesse \mathbf{v}_α de la particule est reliée à \mathbf{p}_α par :

$$m_\alpha \mathbf{v}_\alpha = \mathbf{p}_\alpha - q_\alpha \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_\alpha) \quad (37)$$

(m_α et q_α sont respectivement la masse et la charge de la particule α). Les densités de charge et de courant s'expriment en fonction des grandeurs précédentes :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_\alpha q_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha) \quad (38.a)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha q_\alpha \mathbf{v}_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha) \quad (38.b)$$

Nous utiliserons également leur transformées de Fourier spatiales

$$\rho(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha}} \quad (39.a)$$

$$j(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha}} \quad (39.b)$$

3. Hamiltonien et dynamique en jauge de Coulomb

a) HAMILTONIEN

L'hamiltonien H décrit la dynamique du système formé par le champ transverse et les particules, et a pour expression

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + \\ & + \sum_{\alpha} \left(-g_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \right) \mathbf{S}_{\alpha} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}) + V_{\text{Coul}} + H_R \end{aligned} \quad (40)$$

Le premier terme de H est l'énergie cinétique des particules (voir l'expression (37) de la vitesse).

Le second terme représente l'énergie d'interaction des moments magnétiques de spin portés éventuellement par les particules (g_{α} est le facteur g de la particule α) avec le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha})$.

Le troisième terme, V_{Coul} , est l'énergie du champ longitudinal (énergie de Coulomb)

$$V_{\text{Coul}} = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r \mathbf{E}_{||}^2(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3k |\mathcal{E}_{||}(\mathbf{k})|^2 \quad (41)$$

qui, d'après (4.a) et (39.a), vaut

$$V_{\text{Coul}} = \frac{1}{2\epsilon_0} \int d^3k \frac{\rho^{*}(\mathbf{k})\rho(\mathbf{k})}{k^2} = \sum_{\alpha} \epsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{q_{\alpha}q_{\beta}}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} \quad (42)$$

$\epsilon_{\text{Coul}}^{\alpha}$ est l'énergie coulombienne propre de la particule α , qui s'exprime dans l'espace réciproque sous forme d'une intégrale divergente, à moins d'introduire une coupure k_c

$$\epsilon_{\text{Coul}}^{\alpha} = \frac{q_{\alpha}^2}{2\epsilon_0} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 k^2} = \frac{q_{\alpha}^2}{4\epsilon_0\pi^2} \int_0^{k_c} dk = \frac{q_{\alpha}^2 k_c}{4\epsilon_0\pi^2} \quad (43)$$

Le quatrième terme de H représente l'énergie du champ transverse

$$H_R = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}_{\perp}^2(\mathbf{r}) + c^2 \mathbf{B}^2(r)] \quad (44)$$

qui, compte tenu des expressions (29) et (30) de \mathbf{E}_\perp et \mathbf{B} , se met sous la forme :

$$H_R = \sum_i \hbar \omega_i \left(a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) \quad (45)$$

En présence de champs extérieurs décrits par les potentiels $\mathbf{A}_e(\mathbf{r},t)$ et $U_e(\mathbf{r},t)$, l'hamiltonien (40) doit être modifié de la façon suivante :

$$\mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_\alpha) \rightarrow \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_\alpha) + \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_\alpha, t) ; V_{\text{Coul}} \rightarrow V_{\text{Coul}} + \sum_\alpha q_\alpha U_e(\mathbf{r}_\alpha, t) \quad (46)$$

Notons finalement que l'impulsion du système global champ + particules a également une expression simple en jauge de Coulomb :

$$\mathbf{P} = \sum_\alpha \mathbf{p}_\alpha + \mathbf{P}_R \quad (47)$$

Le premier terme représente l'impulsion des particules et celle du champ longitudinal qui leur est attaché ; le second terme est l'impulsion du champ transverse

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R &= \epsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_j \hbar \mathbf{k}_j a_j^+ a_j \end{aligned} \quad (48)$$

où les champs ont été remplacés par leurs expressions (29) et (30).

b) HAMILTONIENS NON PERTURBÉS ET HAMILTONIEN D'INTERACTION

Il est intéressant de décomposer l'hamiltonien H du système global en trois parties :

$$H = H_P + H_R + H_I \quad (49)$$

où H_P ne dépend que des variables \mathbf{r}_α et \mathbf{p}_α des particules (hamiltonien des particules), H_R ne dépend que des variables a_j et a_j^+ du champ (hamiltonien du rayonnement), H_I dépend à la fois de \mathbf{r}_α , \mathbf{p}_α et de a_j , a_j^+ (hamiltonien d'interaction). A partir de l'expression (40) de H , on obtient, outre H_R donné par (45) :

$$H_P = \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}} \quad (50)$$

$$H_I = H_{I1} + H_{I2} + H_{I1}^S \quad (51)$$

où H_{I1} et H_{I1}^S sont linéaires par rapport aux champs

$$H_{I1} = - \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (52)$$

$$H_{I1}^S = - \sum_{\alpha} g_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \mathbf{S}_{\alpha} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (53)$$

et où H_{I2} est quadratique

$$H_{I2} = \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \mathbf{A}_{\perp}^2(\mathbf{r}_{\alpha}) \quad (54)$$

Pour des systèmes de particules liées, les ordres de grandeur relatifs des différents termes d'interaction sont les suivants :

$$\frac{H_{I2}}{H_{I1}} \approx \frac{q^2 A^2 / m}{qAp / m} = \frac{qAp / m}{p^2 / m} \approx \frac{H_{I1}}{H_P} \quad (55)$$

Pour de faibles intensités du rayonnement, le rapport H_{I1}/H_P est petit, ce qui entraîne que H_{I2}/H_{I1} l'est aussi. Quant au rapport H_{I1}^S/H_{I1} , il est de l'ordre de :

$$\frac{H_{I1}^S}{H_{I1}} \approx \frac{q\hbar B / m}{qAp / m} \approx \frac{\hbar kA}{pA} = \frac{\hbar k}{p} \quad (56)$$

qui est le rapport entre l'impulsion $\hbar k$ du photon et celle, p , de la particule. Pour des photons de faible énergie (par exemple, dans le domaine optique ou microonde) et un électron lié, ce rapport est très petit devant 1.

c) LES ÉQUATIONS DU MOUVEMENT

Dans le point de vue de Heisenberg, elles se déduisent de l'expression (40) de H et des relations de commutation canoniques (20.b) et (36).

Pour la position et la vitesse des particules, on retrouve respectivement la relation (37) entre la vitesse v_{α} de la particule et l'impulsion \mathbf{p}_{α} , et l'équation de Newton-Lorentz, convenablement symétrisée, donnant l'accélération de la particule en présence des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} .

Pour les champs transverses, on retrouve les équations de Maxwell entre opérateurs ; comme les champs transverses s'expriment linéaire-

ment en fonction des a_j et a_j^\dagger , ces équations sont équivalentes aux équations du mouvement des a_j

$$\begin{aligned}\dot{a}_j &= \frac{1}{i\hbar} [a_j, H] \\ &= -i\omega_j a_j + \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega L^3}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} \epsilon_j \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (57)$$

qui sont les équivalents quantiques des équations (18.b), et qui ont la structure d'équations d'oscillateurs harmoniques avec termes sources. En général, leur solution n'est pas calculable explicitement, car le terme source dépend du mouvement des particules, qui sont elles-mêmes affectées par le champ transverse cherché. Toutefois, en l'absence de particules, les évolutions des opérateurs a_j sont découplées et l'équation (57) s'intègre en

$$a_j(t) = a_j(0) \exp(-i\omega_j t) \quad (58)$$

Le mouvement des champs libres s'en déduit immédiatement. Ils s'écrivent comme des sommes d'ondes planes progressives de vecteur d'onde \mathbf{k}_j , de fréquence $\omega_j = ck_j$ et de polarisation ϵ_j . Par exemple :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{\text{libre}}(\mathbf{r},t) &= \sum_j i \sqrt{\frac{\hbar\omega_j}{2\epsilon_0 L^3}} \times \\ &\times \{ a_j(0) \epsilon_j \exp[i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_j t)] - a_j^\dagger(0) \epsilon_j \exp[-i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_j t)] \}\end{aligned}\quad (59)$$

Dans certains calculs, en particulier ceux des signaux de photodétection, il est nécessaire d'isoler les composantes des champs de fréquences positive et négative. Pour les champs libres, les formules du type de (59) en donnent une expression explicite. Par exemple

$$\mathbf{E}_{\text{libre}}^{(+)}(\mathbf{r},t) = \sum_j i \sqrt{\frac{\hbar\omega_j}{2\epsilon_0 L^3}} a_j(0) \epsilon_j \exp[i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_j t)] \quad (60.a)$$

$$\mathbf{E}_{\text{libre}}^{(-)}(\mathbf{r},t) = [\mathbf{E}_{\text{libre}}^{(+)}(\mathbf{r},t)]^+ \quad (60.b)$$

Dans le point de vue de Schrödinger, c'est le vecteur d'état du système qui évolue dans l'espace des états. Cette évolution est gouvernée par l'équation de Schrödinger.

4. Espace des états

En jauge de Coulomb, la dynamique du système global se ramène à celle d'un ensemble de particules non relativistes et d'une collection infinie d'oscillateurs harmoniques représentant les modes du champ

transverse. Quantiquement, l'espace des états \mathcal{E} du système est le produit tensoriel des espaces des états \mathcal{E}_P et \mathcal{E}_R relatifs à chacun de ces sous-systèmes. Les espaces \mathcal{E}_P et \mathcal{E}_R sont eux-mêmes des produits tensoriels d'espaces relatifs respectivement à chacune des particules, et à chacun des modes du champ transverse :

$$\mathcal{E}_P = \dots \otimes \mathcal{E}_\alpha \otimes \dots \quad (61)$$

$$\mathcal{E}_R = \dots \otimes \mathcal{E}_j \otimes \dots \quad (62)$$

Considérons plus particulièrement \mathcal{E}_R . Une base orthonormée de chacun des espaces \mathcal{E}_j est constituée par la base $\{|n_j\rangle\}$ des états propres de l'énergie de l'oscillateur j . Compte tenu des expressions (45) et (48) de H_R et \mathbf{P}_R , l'état $|n_1\rangle \dots |n_j\rangle \dots$, noté de façon plus concise $|\{n_j\}\rangle$, est état propre de ces deux observables :

$$H_R |\{n_j\}\rangle = \left[\sum_j (n_j + \frac{1}{2}) \hbar \omega_j \right] |\{n_j\}\rangle \quad (63.a)$$

$$\mathbf{P}_R |\{n_j\}\rangle = \left(\sum_j n_j \hbar \mathbf{k}_j \right) |\{n_j\}\rangle \quad (63.b)$$

Il représente un état du champ contenant n_1 photons du mode 1, ... n_j photons du mode j , chaque photon d'un mode j contribuant à l'énergie et à l'impulsion totales par les « quanta » élémentaires $\hbar \omega_j$ et $\hbar \mathbf{k}_j$.

Le vide est l'état fondamental de H_R correspondant à $n_1 = \dots = n_j = \dots = 0$. Il sera noté plus brièvement $|0\rangle$ et est caractérisé par la propriété

$$a_j |0\rangle = 0 \text{ pour tout } j \quad (64)$$

Dans chacun des espaces \mathcal{E}_j , les $|n_j\rangle$ ne sont pas les seuls états intéressants. Les états « cohérents » $|\alpha_j\rangle$ jouent un rôle particulier pour la discussion de situations quasi classiques. Ils se déduisent du vide $|0\rangle$ par une transformation unitaire

$$|\alpha_j\rangle = T^+(\alpha_j) |0\rangle \quad (65)$$

définie par

$$T(\alpha_j) = \exp [\alpha_j^* a_j - \alpha_j a_j^+] \quad (66)$$

dont l'action est une translation de l'opérateur a_j de la quantité α_j

$$T(\alpha_j) a_j T^+(\alpha_j) = a_j + \alpha_j \quad (67)$$

L'état $|\alpha_j\rangle$ est état propre de l'opérateur d'annihilation a_j de valeur propre α_j

$$a_j |\alpha_j\rangle = \alpha_j |\alpha_j\rangle \quad (68)$$

et son développement sur la base $\{ |n_j\rangle \}$ est donné par

$$|\alpha_j\rangle = e^{-|\alpha_j|^2/2} \sum_{n_j=0}^{\infty} \frac{(\alpha_j)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} |n_j\rangle \quad (69)$$

5. Approximation des grandes longueurs d'onde et point de vue dipolaire électrique

Les atomes et les molécules sont constitués de particules chargées (électrons et noyaux) formant des états liés dont l'extension spatiale a_0 est typiquement de l'ordre de quelques rayons de Bohr. Supposons qu'un tel système interagisse avec un rayonnement radiofréquence, infrarouge, visible ou ultraviolet. La longueur d'onde λ de ce rayonnement est grande par rapport à a_0 et il est légitime de négliger les variations spatiales du champ électromagnétique sur l'étendue du système de particules : toutes les particules voient le même champ. C'est l'approximation des grandes longueurs d'onde.

Considérons pour simplifier un atome (ou une molécule) globalement neutre, situé près de l'origine $\mathbf{0}$. A l'ordre le plus bas en a_0 , il est caractérisé du point de vue électrique par son moment dipolaire électrique

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \quad (70)$$

Une transformation unitaire sur l'hamiltonien (40) peut faire apparaître explicitement le couplage entre l'atome et le champ sous la forme de l'interaction dipolaire électrique entre le dipole atomique \mathbf{d} et le rayonnement. Aux ordres supérieurs en a_0/λ , la même démarche ferait apparaître les couplages quadrupolaire électrique et dipolaire magnétique, etc... Dans la mesure où nous les négligeons ici, nous omettons également dans H le couplage magnétique de spin H_{II}^S , de sorte que nous partons de l'hamiltonien approché :

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{0})]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_j \hbar \omega_j (a_j^+ a_j + \frac{1}{2}) \quad (71)$$

a) LA TRANSFORMATION UNITAIRE

La transformation

$$T = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{0}) \right] = \exp \left\{ \sum_j (\lambda_j^* a_j - \lambda_j a_j^+) \right\} \quad (72)$$

où

$$\lambda_j = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega_j L^3}} \mathbf{\epsilon}_j \cdot \mathbf{d} \quad (73)$$

est une opération de translation portant à la fois sur les opérateurs \mathbf{p}_α et sur les opérateurs a_j et a_j^+ . Les opérateurs fondamentaux sont en effet transformés selon les lois suivantes :

$$T \mathbf{r}_\alpha T^+ = \mathbf{r}_\alpha \quad (74.a)$$

$$T \mathbf{p}_\alpha T^+ = \mathbf{p}_\alpha + q_\alpha \mathbf{A}(\mathbf{0}) \quad (74.b)$$

$$T a_j T^+ = a_j + \lambda_j \quad (74.c)$$

$$T a_j^+ T^+ = a_j^+ + \lambda_j^* \quad (74.d)$$

La transformation étant indépendante du temps, le nouvel hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned} H' &= TH T^+ \\ &= \sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{\text{Coul}} + \epsilon_{\text{dip}} + \sum_j \hbar\omega_j (a_j^+ a_j + \frac{1}{2}) - \\ &\quad - \mathbf{d} \cdot \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j} [i a_j \mathbf{\epsilon}_j - i a_j^+ \mathbf{\epsilon}_j] \end{aligned} \quad (75)$$

où

$$\epsilon_{\text{dip}} = \sum_j \frac{1}{2\epsilon_0 L^3} (\mathbf{\epsilon}_j \cdot \mathbf{d})^2 \quad (76)$$

b) LES GRANDEURS PHYSIQUES DANS LE POINT DE VUE DIPOLAIRE

Les grandeurs physiques dans le nouveau point de vue sont représentées par les transformées G' des observables G qui les représentent dans le point de vue initial

$$G' = T G T^+ \quad (77)$$

Partant des expressions (37), (21), (23) et (22) des opérateurs représentant respectivement la vitesse de la particule α , le potentiel vecteur transverse, le champ magnétique et le champ électrique transverse, on obtient les expressions des nouvelles observables qui représentent ces grandeurs :

$$\mathbf{v}'_\alpha = T \mathbf{v}_\alpha T^+ = \frac{\mathbf{p}_\alpha}{m_\alpha} \quad (78)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{A}'_{\perp}(\mathbf{r}) &= T \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) T^+ = \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_j \mathcal{A}_{\omega_j} [a_j \mathbf{\epsilon}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} + a_j^+ \mathbf{\epsilon}_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}]\end{aligned}\quad (79)$$

$$\mathbf{B}'(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (80)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{E}'_{\perp}(\mathbf{r}) &= T \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) T^+ \\ &= \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j} [i(a_j + \lambda_j) \mathbf{\epsilon}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} + h.c.] \\ &= \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}_{\perp}(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (81)$$

où $\mathbf{P}_{\perp}(\mathbf{r})$ est la partie transverse de la densité de polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ associée à l'atome lorsqu'on le considère comme un dipôle ponctuel :

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{d} \delta(\mathbf{r}) \quad (82)$$

$$\mathbf{P}_{\perp}(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{\mathbf{\epsilon}_j (\mathbf{\epsilon}_j \cdot \mathbf{d})}{L^3} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} \quad (83)$$

Notons que, d'après (74.a), $\mathbf{r}'_{\alpha} = \mathbf{r}_{\alpha}$ de sorte que la position des particules, le dipôle de l'atome ou la densité de polarisation sont représentés par les mêmes opérateurs dans les deux points de vue.

c) INDUCTION ÉLECTRIQUE

A partir du champ électrique total $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et de la densité de polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, introduisons l'induction électrique :

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (84)$$

Examinons ses propriétés dans l'espace réciproque, où elle s'écrit :

$$\mathcal{D}(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \mathcal{E}(\mathbf{k}) + \frac{\mathbf{d}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (85)$$

(nous avons utilisé la relation (82) pour calculer la transformée de Fourier de $\mathbf{P}(\mathbf{r})$). Avec l'expression (39.a) de $\rho(\mathbf{k})$, l'équation de Maxwell (2.a) s'écrit :

$$\begin{aligned}i \epsilon_0 \mathbf{k} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\alpha} q_{\alpha} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\sum_{\alpha} q_{\alpha} - i\mathbf{k} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{q}_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} + \dots \right]\end{aligned}\quad (86)$$

Le développement en puissance de $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}$ fait dans la formule (86) est justifié à l'approximation des grandes longueurs d'onde dans la mesure où $k r_{\alpha} \simeq k a_0 \ll 1$. Le premier terme du crochet de la formule (86) est

nul parce que le système de charges est supposé globalement neutre. Le second s'exprime en fonction du dipôle électrique. Il vient donc, à l'approximation dipolaire :

$$\varepsilon_0 \mathbf{k} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{k}) + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}}{(2\pi)^{3/2}} = 0 \quad (87)$$

Il apparaît ainsi que $\mathbf{k} \cdot \mathcal{D}(\mathbf{k})$ est nul de sorte que l'induction électrique est transverse pour un système globalement neutre.

Par ailleurs, la polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ est nulle en dehors du système de charges ($r > a_0$), et (84) se réduit à :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}(\mathbf{r}) / \varepsilon_0 \text{ pour } |\mathbf{r}| > a_0. \quad (88)$$

L'induction électrique est donc le champ transverse qui coïncide, au facteur ε_0 près, avec le champ électrique *total* en dehors du système de charges. Un avantage de la nouvelle représentation est de décrire $\mathbf{D}(\mathbf{r})/\varepsilon_0$, et donc ce champ électrique total, par un opérateur très simple. En effet, la transversalité de \mathbf{D} entraîne, d'après (84), que $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}_\perp + \mathbf{P}_\perp$. Il découle alors de (81) que :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}'(\mathbf{r})/\varepsilon_0 &= \mathbf{E}'_\perp(\mathbf{r}) + \frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{P}'_\perp(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) \\ &= i \sum_j \mathcal{E}_{\omega_j}(a_j \mathbf{e}_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} - a_j^+ \mathbf{e}_j e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (89)$$

d) HAMILTONIEN DIPOLAIRE ÉLECTRIQUE

Revenons maintenant à l'hamiltonien H' . Le dernier terme de (75) est le nouvel hamiltonien d'interaction. Compte tenu de (89), il s'écrit

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{D}'(\mathbf{0}) / \varepsilon_0 \quad (90)$$

et représente l'énergie d'interaction entre le dipôle électrique et l'induction électrique. Nous l'écrirons aussi souvent

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{0}) \quad (91)$$

étant entendu que $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$ est l'opérateur mathématique défini par (29) ou (89) en fonction de a_j et a_j^+ . Par habitude, on le désigne souvent par le terme « champ électrique », bien qu'il ne coïncide avec cette grandeur qu'en dehors du système de charge. H' s'écrit ainsi :

$$H' = H'_P + H_R + H'_I \quad (92)$$

H_R est donné par (45), H'_I par (90) et H'_P par

$$H'_P = H_P + \varepsilon_{\text{dip}} \quad (93)$$

Le nouvel hamiltonien des particules s'obtient simplement en ajoutant à H_P donné en (50) une énergie propre dipolaire décrite par l'expression (76). Il faut toutefois noter que, dans H'_P , $\mathbf{p}_\alpha^2/2m_\alpha$ est bien l'énergie cinétique de la particule α , compte tenu de (78), alors que ce n'est pas le cas dans (50), car la vitesse est donnée dans ce point de vue par (37).

Dans tout ce qui précède, l'atome est supposé immobile à l'origine des coordonnées. Dans certains problèmes, il est important de tenir compte du mouvement du centre de masse de l'atome, repéré par \mathbf{R} . Si l'atome est globalement neutre, il suffit, à l'approximation dipolaire électrique, de remplacer, dans H'_I , $\mathbf{0}$ par \mathbf{R} :

$$H'_I = - \mathbf{d} \cdot \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{R})}{\epsilon_0} = - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) \quad (94)$$

RÉFÉRENCES

Pour plus de détails, voir « Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique ».

On pourra aussi se reporter aux ouvrages de Kroll, Heitler, Power, Loudon, Haken.

Bibliographie

- ABRAGAM A., *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1961) ; Les Principes de Magnétisme Nucléaire, Presses Universitaires de France, Paris (1961).
- AGARWAL G.S., *Quantum Statistical Theories of Spontaneous Emission and their Relation to Other Approaches*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 70, Springer Verlag, Berlin (1974).
- ALLEN L. and EBERLY J.H., *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Wiley Interscience, New York (1975).
- BETHE H.A. and SALPETER E.E., *Quantum Mechanics of one-and two-electron atoms*, Plenum, New York (1977).
- BLOEMBERGEN N., *Non-Linear Optics*, Benjamin, New York (1965).
- BROSSEL J., *Pompage Optique*, in Quantum Optics and Electronics, Les Houches (1964), ed. by de Witt C., Blandin A. and Cohen-Tannoudji C., Gordon and Breach, New York (1965), p. 187.
- CARTAN H., *Théorie Élémentaire des Fonctions Analytiques d'une ou plusieurs Variables Complexes*, Hermann, Paris (1975).
- COHEN-TANNOUDJI C., *Atoms in Strong Resonant Fields*, in Les Houches XXVII (1975), *Aux Frontières de la Spectroscopie Laser, Frontiers in Laser Spectroscopy*, Vol. 1, ed. by Balian R., Haroche S. and Liberman S., North Holland, Amsterdam (1977), p. 3.
- COHEN-TANNOUDJI C., DIU B. et LALOË F., *Mécanique Quantique*, Vols. 1 et 2, Hermann, Paris (1973) ; English translation : Quantum Mechanics, Wiley and Hermann, Paris (1977).
- FEYNMAN R.P. and HIBBS A.R., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965).
- FEYNMAN R.P., LEIGHTON R.B. and SANDS M., *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. III : Quantum Mechanics. Addison-Wesley, Reading. Mass. (1966). Traduction française : Les Cours de Physique de Feynman, Vol. III : Mécanique Quantique, InterEditions, Paris (1979).
- GLAUBER R.J., *Coherence and Quantum Detection*, in Quantum Optics, Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, Course XLVII, ed. by Glauber R.J., Academic Press, New York (1969), p. 15.
- GOLDBERGER M.L. and WATSON K.M., *Collision Theory*, Wiley, New York (1964).
- GRYNBERG G., CAGNAC B. and BIRABEN F., *Multiphoton Resonant Processes in Atoms in Coherent Nonlinear Optics*, ed. by M.S. Feld and V.S. Letokhov, Springer Verlag, Berlin (1980) p. 111.

- HAKEN H., *Light*, Vol. 1, North Holland, Amsterdam (1981).
- HANNA D.C., YURATICH M.A. and COTTER D., *Nonlinear Optics of Free Atoms and Molecules*, Springer Verlag, Berlin (1979).
- HERZBERG G., *Spectra of Diatomic Molecules*, D. Van Nostrand, Toronto (1963).
- HEITLER W., *The Quantum Theory of Radiation*, third edition Clarendon Press, Oxford (1954).
- JACKSON J.D., *Classical Electrodynamics*, second edition, Wiley, New York (1975).
- KROLL N.M., *Quantum Theory of Radiation*, in *Quantum Optics and Electronics*, Les Houches (1964), ed. by de Witt C., Blandin A. and Cohen-Tannoudji C., Gordon and Breach, New York (1965), p. 1.
- LANDAU L.D. and LIFSHITZ E.M., *Statistical Physics*, Pergamon Press, London (1963) ; *Physique Statistique*, ed. MIR, Moscou (1967).
- LANDAU L.D. and LIFSHITZ E.M., *The Classical Theory of Fields*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1951) ; Pergamon Press, London (1951) ; *Théorie des champs*, 3e édition, ed. MIR, Moscou (1970).
- LAX M., *Fluctuations and Coherence Phenomena in Classical and Quantum Physics* in Brandeis Summer Institute Lectures 1966, Vol. II, p. 269, ed. by M. Chrétien, E.P. Gross, S. Dréser, Gordon and Breach, New York (1968).
- LETOKHOV V.S. and CHEBOTAYEV V.P., *Nonlinear Laser Spectroscopy*, Springer Verlag, Berlin (1977).
- LEVY-LEBLOND J.M. et BALIBAR F., *Quantique, Rudiments*, InterEditions, Paris (1984).
- LOUDON R., *The Quantum Theory of Light*, Clarendon Press, Oxford (1973).
- LOUISELL W.H., *Quantum Statistical Properties of Radiation*, Wiley, New York (1973).
- MARTIN P., *Measurements and Correlation Functions*, in *Many Body Physics*, Les Houches (1967), ed. by De Witt C. and Balian R., Gordon and Breach, New York (1968), p. 37.
- MERZBACHER E., *Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1970).
- MESSIAH A., *Mécanique Quantique*, Vols. 1 et 2, Dunod, Paris (1964). Traduction anglaise : *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1962).
- MOLLOW B.R., *Theory of Intensity Dependent Resonance Light Scattering and Resonance Fluorescence*, in *Progress in Optics*, Vol. XIX, ed. by Wolf E., North Holland, Amsterdam (1981), p. 1.

- NUSSENZVEIG H.M., *Introduction to Quantum Optics*, Gordon and Breach, New York (1973).
- POWER E.A., *Introductory Quantum Electrodynamics*, Longman, London (1964).
- ROMAN P., *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).
- SARGENT M., SCULLY M.O. and LAMB W.E. Jr., *Laser Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1974).
- SHEN Y.R., *The Principles of Nonlinear Optics*, Wiley, New York (1984).
- SCHIFF L.I., *Quantum Mechanics*, Second edition, McGraw-Hill, New York (1955).
- VAN KAMPEN N.G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North Holland, Amsterdam (1981).

Index

A

Absorption

- entre deux états discrets 76
- entre un état discret et un état du continuum 77
- entre deux états du continuum 80
- dynamique du processus d' 81
- lien avec la diffusion 82
- probabilité par unité de temps 83, 113, 204, 249, 275, 313, 354, 576
- d'un paquet d'ondes 553
- pour un oscillateur harmonique 313
- à deux photons 98, 200, 426, 483
- à deux photons sans effet Doppler 99
- à trois photons 100, 206
- nombre de photons absorbés par unité de temps en régime stationnaire 353
- dans le point de vue de l'atome habillé 398, 401
- d'un faisceau sonde par un atome soumis à un faisceau intense 422, 583
- d'un faisceau sonde par un atome soumis à un faisceau intense et à des collisions 483
- assistée par collisions 481, 483
- saturée 424, 583, 589
(voir aussi multiphotonique)

Absorption et réémission virtuelles de photons 40, 107, 112

Accélération des particules et couplage avec le rayonnement 157, 159, 307, 532

Adiabatique

- branchement, débranchement 10
- élimination (des variables rapides) 286, 348, 575

Amortissement (voir cohérences, radiatif, collisionnel)

Amplification 88, 104, 424, 588

Amplitude de diffusion 84, 217, 523

Amplitude de transition (ou de probabilité)

- généralités 7, 9, 161
- comportement temporel 11
- calcul perturbatif 13, 15, 21, 24, 25
- d'ordre 1 en couplage 13, 27
- d'ordre 2 en couplage 28
- étude non perturbative 70, 161, 195, 217, 227
- interférences entre 103, 106, 192, 446, 484, 512, 562, 563
(voir aussi diagrammatique, non perturbatif)

Analytique(s)

- propriétés de la résolvante 166, 208
- prolongement de la résolvante 166, 212

Annihilation (opérateur d') 597, 599, 604

Anomalie $g - 2$ 112

Anticroisement (de niveaux)

- généralités 199, 441
- résonance d' 443, 454, 461
- d'ordre supérieur 444, 461
- dans le diagramme d'énergie de l'atome habillé 398
- pour un spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons RF 454, 459, 461, 466

Antinormal (ordre) 134, 317, 331

Antirésonnants (termes ou couplage) 342, 395

Approximation (voir champ tournant, grandes longueurs d'onde, vitesses de variation indépendantes)

Asymptotique (état) 159, 217, 224, 227, 526

Atome à deux niveaux

- émission spontanée 179, 273
- absorption et émission induite 275, 398
- diffusion quasi résonnante 91, 104

- équation pilote 273
- équations de Bloch optiques 340
- comparaison avec un oscillateur harmonique 376
- représentation par un spin fictif 345
- susceptibilité non linéaire 578
- relaxation collisionnelle 469
(voir aussi habillé, Langevin)
- Atome à trois niveaux
 - fluorescence intermittente 431
 - résonances noires 434
 - soumis à deux faisceaux laser 422, 425, 431
 - processus radiatifs assistés par collision 476, 483, 484
- Atome habillé (voir habillé)
- Autler-Townes (doublet ou effet) 425
- Autofocalisation 578
- B**
- Battements quantiques (dans la cascade radiative de l'atome habillé) 407
- Bethe (formule de)
 - durée de vie 197
 - déplacement de Lamb 513, 515
- Bilan détaillé (principe ou équation du) 266, 414, 417, 569
- Bloch (équations de) 347
- Bloch (vecteur de) 345
- Bloch-Langevin (équations de) 369, 372, 381
- Bloch-Maxwell (équations de) 340
- Bloch optiques (équations de)
 - généralités 337
 - forme dépendante du temps 341
 - formes indépendantes du temps 343, 344, 345, 347
 - différences avec d'autres équations d'évolution 348
 - transformation en équations de relaxation 575
 - représentation géométrique en termes de spin fictif 345, 410
- solution stationnaire 352, 575
- solution transitoire 351
- lien avec le point de vue de l'atome habillé 409, 414
- Bloch-Siegert (déplacement de) 343, 395, 460
- Born (développement de) 15, 31, 220
- Breit (hamiltonien de) 119
- Bremsstrahlung 75, 522, 531
- Bremsstrahlung inverse 80
- Brownien (mouvement) 250, 321
- C**
- Capture radiative 72
- Cascade radiative
 - définition 188
 - amplitudes d'ordre le plus bas 189
 - amplitude non perturbative 190, 564
 - distribution spectrale des photons émis 191, 564
 - interférences entre plusieurs amplitudes 193, 564
 - pour un oscillateur harmonique 563
 - et corrélation de photons 402, 406, 427
 - de l'atome habillé 400, 401, 404, 406, 415
- Casimir et Polder (effet) 123
- Cavité (émission spontanée dans une) 71, 393
- Centre de masse (voir degrés de liberté)
- Champs électromagnétiques
 - généralités 593
 - développements en variables normales ou en a et a^+ 598, 599
 - liés à une particule 145, 147, 159, 534
 - dans le point de vue dipolaire électrique 608
 - dans le point de vue de Pauli-Fierz 150
 - extérieurs 340
 - en jauge de Coulomb 598

- équation d'évolution de a et a^+ 604
- excitations élémentaires 605
(voir aussi libre, longitudinal, source, transverse, vide)
- Champ tournant (approximation du)** 342, 375, 461
- Cohérences (de la matrice densité)**
 - définition 250
 - équations d'évolution 266, 274, 315, 412, 474
 - amortissement et déplacement de fréquence 267, 274, 315, 413, 474
 - transfert de 315, 412
 - couplage avec les populations 348
 - élimination adiabatique 348, 575
 - réduites 413
 - induites par collision 477
- Cohérence (résonance de)** 446, 456, 463
- Cohérent(e,s)**
 - état 316, 320, 393, 396, 415, 533, 571, 605
 - diffusion 103, 366, 368, 421, 481
- Collision(s)**
 - processus assisté par 468
 - déphasante 470, 575, 586
 - temps caractéristiques 469, 478
 - limite d'impact 474, 481
 - moyenne sur 471, 486
 - matrice S de 486
 - résonances ou cohérences induites par 477, 478, 484
 - fluorescence en présence de 478, 480
 - croisement de niveaux au cours d'une 488
- Collisionnel(le,s)**
 - processus 468
 - transferts entre niveaux habillés 472
 - amortissement et déplacement 474
 - taux de transfert 472, 474, 486
 - redistribution 478
(voir aussi relaxation collisionnelle)
- Commutation (relations de)**
 - des champs quantiques 597
 - du dipôle atomique et du champ libre 366, 383
 - des opérateurs a et a^+ 598, 599
 - des particules 600
- Comptage de photons** 403
(voir aussi corrélations de photons)
- Compton (diffusion)** 86, 89
- Conditions aux limites périodiques** 598, 599
- Conservation (manifestations de la)**
 - de l'énergie 27, 68, 76, 79, 90, 97, 99, 105
 - de l'impulsion 68, 76, 79, 90, 99, 283, 358
 - du moment cinétique 99, 450
- Contact (interaction de)** 544
- Continuum**
 - généralités 32
 - couplé à un état discret (voir discret)
 - couplé à un continuum 15, 36
 - plat 48
 - discrétisé 49
 - de largeur finie 233, 238
 - d'ionisation 72, 74, 77, 80, 89, 90, 101, 126
- Corrections radiatives**
 - spontanées 107, 115, 145
 - de masse 107, 111, 155, 306, 519, 542
 - à la diffusion élastique par un potentiel 522
 - du facteur g 112, 464, 549
 - stimulées 112, 115, 203, 304, 460, 464
- Corrélation(s)**
 - entre le système et le réservoir 255, 258, 271, 428
 - entre deux dipôles atomiques 561
 - temps de 251, 322, 400, 478
- Corrélation (fonction de)**
 - généralités 125, 129
 - du dipôle atomique 131, 365, 368, 385

- du champ de rayonnement 131, 251, 302
- d'ordre supérieur 142, 371, 427
- symétrique 292
- du réservoir 257, 300
- du champ du vide 302
- pour une particule brownienne 324
- des forces de Langevin 322, 329, 384
- Corrélations de photons**
 - expression du signal 140, 143, 364
 - lien avec la fonction de corrélation du dipôle émetteur 365, 371
 - dégroupement de photons 402, 407
 - point de vue de l'atome habillé 402, 406, 427
 - délai entre deux émissions successives 402, 430
 - entre photons de fluorescence filtrés en fréquence 405
 - dans les systèmes à trois niveaux 431
- Coulomb**
 - potentiel de 596
 - interaction de 17, 20, 118, 601
 - énergie propre de 17, 306, 601
 - jauge de 17, 20, 596, 598
- Couplage** (voir continuum, discret, indirect, non résonnant)
- Coupure**
 - singularité de la résolvante 166, 175, 211, 213
 - dans le développement en modes du champ 146
- Création** (opérateur de) 598, 599
- Croisement de niveaux**
 - résonances de 446, 456, 463, 509
 - dans le diagramme d'énergie d'un spin $\frac{1}{2}$ habillé 453, 456, 459, 463, 466
 - au cours d'une collision 488
- Cyclotron** (fréquence) 112, 306, 538, 550
- D**
- Décroissance exponentielle**
 - d'une amplitude de probabilité 14, 55, 183, 233
 - corrections à la 185, 216, 243
- Degrés de liberté**
 - internes 273, 280, 351, 355, 494
 - externes ou de translation ou du centre de masse 280, 290, 354, 359, 434, 494
- Dégroupement** (de photons) 402, 407
- Délai** (entre deux émissions successives) 402, 430, 431
- Delta-transverse** (fonction) 122, 600
- Densité**
 - de charge et de courant 594, 600
 - de polarisation 608
- Densité** (opérateur, matrice) 250, 349
(voir aussi réduit, factorisation)
- Densité d'états**
 - pour une particule matérielle 32
 - pour un photon 34
 - cas général 34, 209
- Densité spectrale** 133, 138
(voir aussi spectral)
- Déphasage** (dû à une collision) 470
- Déplacement de niveau** (ou de résonnance)
 - généralités 11, 14
 - radiatif 108, 110, 182, 183, 191, 224, 274, 303, 305, 313, 513
 - lumineux 114, 203, 206, 278, 305, 314
 - dans le domaine des radiofréquences 460, 462, 463
 - dû au couplage avec un réservoir 267, 297
 - interprétation physique 297, 303
 - collisionnel 474
- Déplacement** (opérateur)
 - généralités 171, 173
 - non hermiticité 174, 196, 204
 - calcul approché 175, 177, 180, 195, 202, 444
 - pour un état atomique excité 181
 - pour un niveau discret couplé à un niveau instable 195

- pour deux niveaux discrets couplés indirectement 202
- pour deux niveaux discrets couplés au même continuum 558
- Dérive (vitesse ou terme de) 319, 332, 386
- Désintégration
 - d'un état discret couplé à un continuum 14, 55, 233
 - radiative 110, 183, 557
- Développement des champs (voir champs)
- Diagrammatique (représentation)
 - des éléments de matrice du couplage 22
 - des amplitudes de transition 21, 23
 - resommation de la série des perturbations 168, 176, 181, 187, 190, 192, 222, 223
 - des divers processus radiatifs (voir les rubriques correspondantes)
- Diagramme d'énergie
 - de l'atome habillé 394, 397, 398, 402, 404, 406, 435
 - d'un spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons de radiofréquence 449, 454, 466
- Dicke (effet) 70, 494
- Diffusion d'une particule par un potentiel 522
- Diffusion d'un photon
 - amplitude de 84, 217
 - section efficace de 16, 37, 113, 499, 503, 506, 510
 - Compton 86, 89
 - Raman 87
 - Rayleigh 86, 499
 - résonnante 58, 86, 91, 221, 506
 - résonnante au voisinage d'un croisement de niveaux 509
 - quasi résonnante 104
 - d'un paquet d'ondes 94
 - Thomson 88, 503
 - cohérente 103, 366, 368, 421, 481
 - incohérente 366, 368
- élastique 86, 88, 368, 421, 503
- inélastique 87, 89, 368, 370, 421
- Diffusion (coefficient ou terme de)
 - pour l'impulsion d'une particule brownienne 323
 - pour l'impulsion d'un atome 287, 288
 - pour un oscillateur harmonique amorti 319, 334
 - pour un atome à deux niveaux 382, 385, 387
 - associé aux forces dipolaires 437
- Dipolaire électrique
 - point de vue 606
 - hamiltonien 607, 609
 - énergie propre 514, 607, 610
- Dipôle atomique
 - d'un atome à deux niveaux 342
 - composantes en phase et en quadrature avec le champ incident 345, 347, 352, 357, 360, 578, 584
 - lien avec le champ rayonné 363
 - commutateur avec le champ libre 366, 383
 - dans la base des niveaux habillés 418, 583
 - (voir aussi corrélation)
- Dipôle-dipôle (interaction) 544
- Discret (état)
 - éloigné de tous les autres états 11
 - couplé à un autre état discret proche 12, 32
 - couplé à un continuum plat 48
 - couplé à un continuum quelconque 13, 35, 62, 69, 82
 - couplé à un continuum de largeur finie (modèle simple soluble) 233
 - couplé à un état instable 56, 193
 - états couplés à un même continuum 561
 - densité de présence dans un continuum 50, 53, 93, 213
 - (voir aussi anticroisement, indirect)
- Discrétisation
 - d'un continuum 49

- des modes du champ 598
- Dispersion (relation de) 182
- Dissipation d'énergie 295
- Dissipative
- susceptibilité 296
- force 357
- Dissociatif (état) 73, 79
- Dissociation radiative 73
- Divergence
 - des corrections radiatives 109
 - infrarouge 525, 531
- Doppler (effet) 70, 99, 281, 282, 283, 288, 583
- Durée de vie 14, 55, 70, 183, 198, 491, 557
- E
- Echanges de photons 116, 119, 158
- Echanges d'énergie
 - entre système et réservoir 299
 - entre atome et rayonnement 306, 353
- Echanges d'impulsion entre atome et rayonnement 283, 288, 358, 360
- Echelles de temps 251, 259, 269, 355, 400, 478
- Effectif (hamiltonien) 38, 116, 196, 204, 403, 432, 444, 538
- Efficace (champ) 347
- Einstein
 - équations d' 249, 277
 - relation d' (pour le mouvement brownien) 323
 - relation d' (pour l'effet photo-électrique) 78
 - coefficients d' 83, 249
 - généralisation de la relation d' 334, 386
- Elargissement radiatif 114
- Elastique (diffusion) 86, 88, 368, 421, 503
- Electrodynamique quantique
 - en jauge de Coulomb 17, 593
- dans le point de vue dipolaire électrique 606
- dans le point de vue de Pauli-Fierz 145, 150, 153
- Emission et réabsorption virtuelles de photons 40, 107, 110, 116, 223
- Emission induite
 - généralités 76
 - pour un atome à deux niveaux 249, 276
 - pour un oscillateur harmonique 313
 - probabilité par unité de temps 249, 276, 576
 - lien avec la force dipolaire 360
 - dans le point de vue de l'atome habillé 398
- Emission spontanée
 - entre deux états atomiques discrets 67
 - probabilité par unité de temps 68, 182, 249, 491
 - dans une cavité 71
 - par un ion piégé 494
 - de deux atomes proches 558
 - entre un état du continuum et un état discret 71
 - entre deux états du continuum 74
 - à deux photons 96
 - amplitude pour que l'atome reste excité 179
 - distribution spectrale des photons émis 185, 191
 - amplitude d'émission d'un photon 185, 191
 - nombre de photons émis par unité de temps en régime stationnaire 354
 - description par une équation pilote 273, 408
 - pour un oscillateur harmonique 313, 320, 563
 - pour l'atome habillé 400, 408
 - en présence de collisions 478
- Energie propre
 - de Coulomb 17

- dipolaire électrique 514, 607, 610
 - d'un moment magnétique 547
- Equation pilote
- généralités 249, 348
 - établissement 254
 - pour les populations 264, 274, 276
 - pour les cohérences 266, 274, 278
 - pour un atome à deux niveaux 273
 - pour les vitesses atomiques 279
 - pour un oscillateur harmonique amorti 309
 - forme opératorielle 260, 310, 408, 409, 472
 - dans la base des états cohérents 316
 - discussion des approximations 269
 - pour l'émission spontanée de l'atome habillé 408
 - dans la base des niveaux habillés 410, 473
 - (voir aussi relaxation collisionnelle)
- Équilibre thermodynamique 266, 277, 289, 303, 316, 320, 323, 331, 569
- Etagère (méthode de l') 433
- Evolution (opérateur d') 25, 163, 166
- Espace des états 604
- Excimères, exciplexes 73
- Excitation (probabilité d') 127, 553
- Excité (évolution d'un état atomique) 179, 491
- Externes (voir degrés de liberté)
- Extérieurs (champs) 340, 571, 602
- F
- Facteur g 112, 549
- Factorisation (de l'opérateur densité) 258, 270, 428
- Fano (profils de) 59, 101
- Fermi
- règle d'or de 13
 - interaction de contact de 544
- Fictif (spin) 345, 410, 472, 473
- Fierz (voir Pauli)
- Fluctuations
- dynamique des 292
 - du réservoir 257, 291, 298, 300
 - du vide 109, 111, 157, 251, 302, 304, 307, 381, 521, 549
 - du rayonnement 131, 302, 307
 - lien entre fluctuations et dissipation 303, 323, 330, 387
 - du dipôle atomique 366, 369, 385
 - des forces radiatives 356, 437
- Fluorescence intermittente 431
- Fluorescence de résonance
- généralités 94, 363
 - expression des signaux 364
 - intensité totale 365, 366
 - répartition spectrale 106, 365, 368
 - corrélations de photons 371, 402, 405, 427
 - étude perturbative 105, 370
 - dans le point de vue de l'atome habillé 400, 402, 405, 418, 427
 - triplet de fluorescence 106, 370, 405, 418
 - intermittente 431
 - en présence de collisions 480
- Flux incident
- pour une particule matérielle 36
 - pour un photon 36
- Fokker-Planck (équation de)
- pour le mouvement brownien 251
 - pour un oscillateur harmonique amorti 319
 - pour la fonction de distribution des vitesses d'un atome 283, 287
- Fonctions (voir corrélation, Green)
- Forces dipolaires
- moyennes 359, 436
 - dans le point de vue de l'atome habillé 434
 - fluctuations des 437
- Force d'oscillateur 492, 499
- Forces radiatives moyennes 354, 436
 - (voir aussi forces dipolaires, pression de radiation)
- Franken (effet) 447, 509

- Freinage (rayonnement de) 74, 80, 522, 531
- Fréquence positive, négative (composante des champs de) 132, 343, 364, 604
- Friction (force ou coefficient de) 250, 287, 288, 321
- G**
- Glauber (représentation P de) 316, 318, 320
- Grandes longueurs d'onde (approximation des) 159, 606
- Green (fonction de) 163, 319
- Gros grains (vitesse de variation à) 251, 258, 471, 479, 486
- H**
- Habillé (atome)
- généralités 389, 392
 - hamiltonien 390, 393, 395, 449
 - états non couplés 393, 394, 401, 449
 - multiplicités 394, 432
 - états couplés ou habillés (énergies et fonctions d'onde) 396, 435, 453
 - diagramme d'énergie 394, 397, 398, 402, 404, 406, 435, 449, 454, 466
 - processus d'absorption et d'émission induite 398, 401
 - absorption d'un faisceau sonde 422, 483, 583
 - fluorescence de résonance 400
 - cascade radiative 400, 401, 404, 406, 415
 - corrélations de photons 402, 405, 427
 - transitions permises entre niveaux habillés 404
 - triplet de fluorescence 405, 418
 - équation pilote pour l'émission spontanée 408
 - lien avec les équations de Bloch optiques 409, 414
- forces dipolaires 434
 - dans le domaine des radiofréquences 440
 - croisement de niveaux habillés 453, 456, 459, 463, 466
 - anticroisement de niveaux habillés 398, 454, 459, 461, 466
 - facteur de Landé 460, 464
 - processus collisionnels 472
 - à trois niveaux 422, 425, 431, 434, 476, 483, 484
- Hamiltonien
- en jauge de Coulomb 17, 601
 - dipolaire électrique 607, 609
 - de Pauli-Fierz 153, 156
 - du rayonnement 17, 601
 - des particules 19, 20, 602
 - d'interaction entre particules et champ transverse 18, 156, 501, 505, 603
 - effectif 38, 116, 196, 204, 403, 432, 444, 538
 - non hermitique 174, 196, 204, 349, 403, 432
- Hanle (effet) 447, 456, 509
- Harmoniques (génération d') 102
- Heisenberg-Langevin (équations de)
- pour un oscillateur harmonique amorti 327, 377
 - pour un atome à deux niveaux 349, 377, 380
- Hilbert (transformée de) 182
- I**
- Impact (limite d')
- définition 342, 474
 - équation pilote à la 474
 - triplet de fluorescence à la 480
 - matrice S de collision à la 476, 487
- Impulsion du champ, des particules 602
(voir aussi conservation, échanges d'impulsion, vitesse atomique)

- Incohérente (diffusion) 366, 368
- Indice (d'un milieu) 115, 578
- Indirect (couplage entre deux états) 45, 56, 81, 92, 116, 193, 200, 204, 444, 459, 462, 561
- Induction électrique 608
- Induite (voir émission induite)
- Inélastique (diffusion) 87, 89, 368, 370, 421
- Infrarouge (catastrophe ou divergence) 525, 531
- Instables (états) 212
- Intégrale de contour 166, 215
- Intégrodifférentielle (équation) 237, 328
- Intensité (du rayonnement) 137
(voir aussi fluorescence)
- Interaction (voir contact, dipôle-dipôle, échanges de photons, hamiltonien, magnétique, point de vue)
- Interférences entre amplitudes de transition 103, 106, 192, 446, 484, 512, 562, 563
- Intermittente (fluorescence) 431
- Internes (voir degrés de liberté)
- Ionisation
- énergie d' 72, 77, 126
 - continuum d' 72, 74, 77, 80, 89, 90, 101, 126
 - à un photon 77, 78, 135
 - à plusieurs photons 101
 - à plusieurs photons et en présence de collisions 484
- J
- Jauge 20, 595
- K
- Kramers 159, 460
- Kuhn (voir Thomas)
- L
- Lamb
- déplacement de 111, 158, 304, 513
 - transition de 193
- Lamb-Dicke (effet) 70, 494
- Landau (formule de) 490
- Landé (facteur de)
- pour l'électron 112, 306, 549
 - de l'atome habillé 464
- Langevin (équation de)
- pour le mouvement brownien 250, 321
 - pour un oscillateur harmonique amorti 327
 - pour un atome à deux niveaux 350, 369, 372, 377, 381
- Langevin (force de)
- pour le mouvement brownien 250, 321, 322
 - pour un oscillateur harmonique amorti 328, 331
 - valeur moyenne 322, 329, 382
 - fonctions de corrélation 322, 324, 329, 382, 384
 - pour un atome à deux niveaux 350, 369, 381, 382
- Largeur naturelle 71, 110, 139, 191, 553
- Larmor (fréquence ou précession de) 112, 346, 465, 549
- Libre (champ) 130, 366, 377, 383, 534, 604
- Lié (champ transverse) 145, 147, 159, 534
- Liénard-Wiechert (potentiels de) 147
- Linéaire (réponse) 152, 291, 294
(voir aussi susceptibilité)
- Longitudinal (champ) 594, 595
- Lumineux (voir déplacement de niveau)
- M
- Magnétique(s)
- moment 112, 448, 549, 601

- interactions 118, 158, 544
 - Markov (processus de)** 259
 - Masse**
 - correction de 107, 111, 155, 306, 519, 542
 - réduite 494
 - Matrice de transition** 15, 92, 93, 220, 231
 - Matrice S**
 - définition 10, 15, 218, 227
 - développement perturbatif 15, 27, 30
 - lien avec la résolvante 218, 228
 - Maxwell (équations de)** 593
 - Mélange à plusieurs ondes** 486, 578
 - Métastable (état)** 96, 193, 200
 - Mode(s) (de vibration du champ)**
 - généralités 596
 - développement en 598, 599
 - nombre moyen de photons par 276
 - laser 389, 392
 - Monochromatique (voir rayonnement)**
 - Mössbauer (effet)** 70, 494
 - Moyennes**
 - à un temps 135, 256, 364
 - à deux temps 129, 257, 291, 331, 335, 369, 382, 385, 418, 420, 421, 427
 - Multiphotoniques (processus)**
 - généralités 96
 - émission spontanée 96
 - ionisation 101, 484
 - absorption 98, 99, 100, 200, 206, 426, 462, 483
 - génération d'harmoniques 102
 - diffusion quasi résonnante 104
 - dans le domaine des radiofréquences 99, 462
 - probabilité de transition par unité de temps 204, 206
 - fréquence de Rabi généralisée 205, 206, 462
 - N**
 - Naturelle (voir largeur)**
 - Non hermitique (opérateur)** 174, 196, 204, 349, 403, 432
 - Non linéaire (réponse ou susceptibilité)** 377, 578
 - Non perturbatif(ve,s,ves)**
 - approche ou calcul 161, 272, 353, 464, 531
 - amplitude de transition 70, 161, 179, 202
 - matrice de transition 92, 93, 220, 231
 - amplitude de diffusion 217
 - Non résonnant (couplage)** 38, 342, 395, 461
 - Normal (ordre)** 132, 317, 331, 378
 - Normale (variable)** 148, 531, 596
- O**
- Opérateur (voir annihilation, création, déplacement, évolution, translation)**
 - Oscillateur harmonique amorti**
 - équation pilote 309
 - absorption et émission 313
 - déplacement de niveaux 313, 314
 - évolution des populations 313
 - évolution des cohérences 315
 - densité de quasi-probabilité 316
 - cascade radiative 193, 563
 - équation de Fokker-Planck 319
 - équations de Heisenberg-Langevin 327
 - comparaison avec un atome à deux niveaux 376
- P**
- Paquet d'ondes (diffusion d'un ou excitation par un)** 94, 226, 553
 - Pauli-Fierz (transformation ou point de vue de)** 109, 145, 149, 513, 522, 531
 - Périodiques (voir conditions aux limites)**
 - Perturbatif (développement)**
 - de la résolvante 167, 168

- de l'opérateur d'évolution 21, 25, 163
 - de l'opérateur déplacement 172
 - de la matrice S 15, 27, 30
 - Phase (accord de) 103, 106, 579
 - Photodétecteur
 - à bande large 126, 134
 - à bande étroite 126, 137
 - Photodétection (signaux de)
 - calcul des 125, 128
 - double 140
 - pour un détecteur à bande large 135, 364
 - pour un détecteur à bande étroite 138, 364
 - lien avec les moyennes à un ou deux temps du dipôle émetteur 363
 - Photodissociation 79
 - Photoionisation
 - simple 77, 78, 135
 - à plusieurs photons 101
 - à plusieurs photons et en présence de collisions 484
 - Pièges (pour atomes neutres) 362, 438
 - Point de vue
 - de Schrödinger 9, 24, 262, 604
 - de Heisenberg 321, 349, 354, 372, 603
 - d'interaction 24, 254, 262
 - dipolaire électrique 606
 - $A.p$ et $E.r$ 501, 505, 513
 - de Pauli-Fierz 109, 145, 149, 513, 522, 531
 - Polarisabilité atomique 499, 578
 - Polarisation
 - énergie de 295, 297, 298
 - densité de 608
 - Polarisation (du rayonnement)
 - sommation sur 36, 599
 - circulaire 100, 450, 452
 - linéaire 450, 458
 - Pôles (de la résolvante) 166, 178, 210, 212
 - Populations (de niveaux d'énergie)
 - définition 250
 - équation d'évolution 264, 274, 276, 313, 411, 472, 576
 - transfert ou flux 349, 472, 569
 - équilibre thermodynamique 266, 277, 569
 - couplage avec les cohérences 348
 - réduites 413, 480
 - Potentiels (vecteur et scalaire) 595
 - Pression de radiation 357
 - Probabilité de transition (voir les rubriques correspondant aux divers processus ; voir aussi Fermi)
 - Projection (opérateurs de) 170
 - Propagateur 163, 165, 235
 - Propagation des interactions (corrections liées à la) 118, 123
- Q
- Quantification canonique 597
 - Quasi classique (état), (voir cohérent)
 - Quasi-probabilité (densité de) 317
 - Quasi résonnant(e)
 - état intermédiaire 100, 102, 104
 - diffusion 104
 - excitation 342
 - Quasi stationnaire (état pour la cascade radiative de l'atome habillé) 415
- R
- Rabi
 - fréquence, nutation ou oscillation de 12, 32, 71, 82, 139, 199, 205, 233, 239, 247, 341, 347, 351, 396, 399, 401, 407, 431, 440, 443
 - Radiatif(ve,s)
 - durée de vie 70, 183, 491
 - capture 72
 - dissociation 73
 - Pôles (de la résolvante) 166, 178, 210, 212

- amortissement 274, 338, 351, 413, 414, 491
- désintégration 110, 183, 557
- élargissement 114
(voir aussi cascade radiative, corrections radiatives)
- Radiofréquences (domaine des) (voir habillé, résonance magnétique)**
- Raman**
 - diffusion 87
 - effet Raman stimulé 88
- Rayleigh (diffusion) 86, 499**
- Rayon classique (de l'électron) 89, 499, 503**
- Rayonnement**
 - de freinage 74, 80, 522, 531
 - densité d'énergie à la fréquence ω 249, 278, 305
 - à large bande spectrale et faible intensité 252, 275, 280, 300
 - du corps noir 249, 252
 - isotrope et non polarisé 277, 280, 300
 - monochromatique 338, 340, 389
 - réaction de 305, 307, 381
 - lien entre descriptions quantique et classique 340, 396, 571
(voir aussi fluctuations)
- Réaction**
 - de rayonnement 305, 307, 381
 - du réservoir 298
- Réactive**
 - susceptibilité 297, 298
 - force 357, 359
- Recul (énergie ou effet de) 69, 77, 99, 281, 283, 355, 359, 496**
- Redistribution du rayonnement**
 - dans une onde stationnaire 360
 - collisionnelle 478
- Réduit(e,es)**
 - opérateur densité 250, 254
 - populations et cohérences pour l'atome habillé 413, 480, 583
- Référentiel tournant 346, 351**
- Régression quantique (théorème de)**
 - pour un oscillateur harmonique amorti 335
 - pour un atome à deux niveaux 369, 372, 385, 420, 421
- Reiche (voir Thomas)**
- Relaxation (équations de) (voir équation pilote)**
- Relaxation (temps de) 269, 400, 478**
- Relaxation collisionnelle**
 - en l'absence d'irradiation laser 469
 - en présence d'irradiation laser 472
 - équation pilote décrivant la 470
 - dans la base des niveaux habillés 472, 487
 - équation pilote à la limite d'impact 475
- Renormalisation 159, 232**
- Réponse linéaire (voir linéaire, susceptibilité)**
- Réseau**
 - moments de transition 485
 - d'atomes excités 485
- Réservoir**
 - généralités 251
 - état 255, 275, 569
 - moyennes à un et deux temps d'observables du 256, 259
(voir aussi corrélation, fluctuations, réaction, susceptibilité)
- Résolvante**
 - définition 165
 - lien avec l'opérateur d'évolution 166, 215, 236, 442
 - propriétés analytiques 166, 208
 - prolongement analytique 166, 211, 212
 - développement perturbatif 167, 168
 - restriction dans un sous-espace 171, 180, 195, 201, 234, 444, 558
 - restriction entre deux sous-espaces 173, 186, 553
 - lien avec la matrice S 218, 228
(voir aussi resommation)

- R**
- Resommation (du développement perturbatif de la résolvante)
 - formelle 168
 - partielle 176, 181, 187, 190, 222, 223
 - Résonance (associée à un état instable) 95, 215
 - Résonance magnétique
 - à un photon 100, 454, 459
 - à plusieurs photons 100, 462
 - de cohérence 456, 463
 - Résonances noires 434
 - Résonnante (diffusion) 58, 86, 91, 221, 506, 509
 - Rétrécissement par le mouvement (condition de) 252, 270
- S**
- Saturation (paramètre de) 353
 - Saturée (absorption) 424, 583, 589
 - Saut quantique 401, 429, 433
 - Section efficace d'un processus 16
 - (voir aussi diffusion d'un photon)
 - Séculaire (approximation ou limite) 262, 266, 410, 422, 424, 473
 - Sonde (faisceau) 422, 483, 583
 - Source(s)
 - atome 143, 365
 - champ des 364, 377, 379
 - Spectrale (densité ou puissance) 133, 138, 249, 298, 302
 - Spectrale (distribution)
 - des photons émis spontanément par un atome excité 185, 191
 - des photons émis dans une cascade radiative 191, 192, 564
 - des photons de fluorescence de résonance 106, 364, 368, 418
 - des photons absorbés sur un faisceau sonde 422, 483
 - Spin(s)
 - spin $\frac{1}{2}$ fictif 345, 410, 472, 473
 - spin $\frac{1}{2}$ habillé par des photons radiofréquence 448
- (voir aussi anticroisement, croisement, diagramme d'énergie)**
- interactions magnétiques entre 544
- S**
- Spontanée (voir émission)
 - Stark dynamique (effet) 114, 305
 - (voir aussi déplacement de niveau lumineux)
 - Stationnaire (état ou régime)
 - pour un atome à deux niveaux 277, 352
 - pour les vitesses atomiques 289
 - pour un oscillateur harmonique amorti 316, 320
 - pour les populations et cohérences réduites de l'atome habillé 414
 - Statistiques (fonctions) 291, 301
 - Stern et Gerlach optique (effet) 436
 - Stimulée(s) (voir émission induite, corrections radiatives)
 - Stokes, anti-Stokes (diffusion Raman) 87
 - Superradiance et subradiance 558
 - Susceptibilité linéaire
 - d'un oscillateur classique 293, 296
 - d'un système quantique 294
 - du réservoir 257, 294, 298, 300
 - du rayonnement 302
 - (voir aussi dissipative, réactive)
 - Susceptibilité non linéaire 578
- T**
- Taux de transition (voir les rubriques probabilité de transition par unité de temps des divers processus ; voir aussi équation pilote, populations)
 - Thomas-Reiche-Kuhn (règle de) 501
 - Thomson (diffusion) 88, 503
 - Townes (voir Autler)
 - Transformation (voir unitaire)
 - Transition (voir amplitude, matrice)
 - Transitoire (régime) 351, 414, 416
 - Translation (opérateur de)
 - pour a et a^+ 149, 537, 572, 605

- pour une particule 152
(voir aussi degrés de liberté de)
- Transverse (champ) 594, 595, 609
(voir aussi lié)
- Triplet de fluorescence
- étude à partir des équations de Bloch optiques 368, 370
- dans le point de vue de l'atome habillé 405, 418
- en présence de collisions 480
- raies latérales 106, 405, 420, 480
- raie centrale 106, 405, 421, 481
- U**
- Unitaire (transformation) 41, 149, 544, 550, 571
- V**
- Van der Waals (interactions de) 119, 122
- Variance (vitesse de variation de la) 323, 332
- Vecteur de Bloch 345
- Vertex 22
- Vibration
 - d'une particule dans le champ transverse 152, 157
 - d'un ion piégé 495
- Vide
 - état 67, 107, 145, 273, 605
- fluctuations du 109, 111, 157, 251, 302, 304, 307, 381, 521, 549
- champ du 364
- Virtuelles (transitions) 40, 47, 107, 112, 187
- Virtuels (photons) 119, 159, 160, 224, 225, 526
- Vitesse(s) atomique(s)
 - opérateur 538, 600, 607
 - fonction de distribution des 283
 - évolution des 279
 - taux d'amortissement des 287
 - coefficient de diffusion des 287, 288
- Vitesse de dérive 319, 332, 386
- Vitesses de variation indépendantes (approximation des)
 - pour un atome soumis à un champ laser 341, 408, 412
 - pour un atome subissant des collisions 342, 474, 575
- W**
- Weisskopf-Wigner (décroissance exponentielle de) 55, 233, 242
- Wiechert (voir Lienard)
- Wiener-Khinchine (théorème de) 326
- Wigner (distribution de) 317
- Wigner-Brillouin (développement de) 224

Collection « Savoirs Actuels »

Directeur : Michèle Leduc

Physique

- *Analyse continue par ondelettes*, B. Torrésani
- *Des phénomènes critiques aux champs de jauge. Une introduction aux méthodes et aux applications de la théorie quantique des champs*, M. Le Bellac
- *Gravitation relativiste*, R. Hakim
- *Magnétisme et supraconductivité*, L.P. Lévy
- *Photons et atomes – Introduction à l'électrodynamique quantique*, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg
- *Physique des plasmas* (tome 1 et tome 2), A. Bers, J.-L. Delcroix
- *Processus d'interaction entre photons et atomes*, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg
- *Théorie des formes de croissance – Digitations, dendrites et flammes*, P. Pelcé
- *Théorie statistique des champs* (tome 1 et tome 2), J.-M. Drouffe, C. Itzykson

Chimie

- *Aspects de la chimie des composés macrocycliques*, B. Dietrich, J.-M. Lehn, P. Viout
- *Chimie moléculaire et supramoléculaire des sucres – Introduction chimique aux glycosciences*, S. David
- *De la solution à l'oxyde – Condensation des cations en solution aqueuse. Chimie de surface des oxydes*, J.-P. Jolivet avec le concours de M. Henry et J. Livage
- *Éléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, J.-L. Rivail
- *Liaisons intermoléculaires – Les forces en jeu dans la matière condensée*, A. Gerschel
- *Orbitales frontières*, Nguyêñ Trong Anh
- *Synthèse et catalyse asymétriques – Auxiliaires et ligands chiraux*, J. Seyden-Penne

Astrophysique

- *Les Étoiles*, F. Praderie, E. Schatzman
- *Galaxies et cosmologie*, A. Blanchard, P. Boissé, F. Combes, A. Mazure
- *Méthodes physiques de l'observation*,
P. Léna avec le concours de F. Lebrun et F. Mignard

Mathématiques

- *Géométrie algébrique – Une introduction*, D. Perrin
- *Groupes quantiques – Introduction au point de vue formel*, A. Guichardet
- *Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser*,
S. Alinhac, P. Gérard
- *Théorie des fonctions holomorphes de plusieurs variables*,
Ch. Laurent-Thiébaut

par  Achevé d'imprimer
en juillet 2001
IMPRIMERIE LIENHART
à Aubenas d'Ardèche

Dépôt légal juillet 2001

N° d'imprimeur : 3440

Printed in France