



# Interactions Rayonnement - Matière

## Sommaire

|  |     |
|--|-----|
| <b>Généralités</b> . . . . .   | 1   |
| 1 : Intérêt de l'étude des interactions rayonnement-matière . . . . .            | 3   |
| 2 : Notions de relativité . . . . .  | 9   |
| 3 : Rayonnement de la charge accélérée . . . . .                                 | 19  |
| 4 : Champ électromagnétique classique dans une cavité . . . . .                  | 27  |
| 5 : Dénombrement des modes et loi de Planck . . . . .                            | 31  |
| 6 : Théories quantiques relativistes . . . . .                                   | 33  |
| 7 : Dynamique quantique et représentations . . . . .                             | 43  |
| 8 : Transitions quantiques sous l'influence d'une perturbation externe . . . . . | 49  |
| 9 : Perturbations oscillante et adiabatique . . . . .                            | 53  |
| 10 : Règle d'or de Fermi . . . . .   | 57  |
| <br>   |     |
| <b>Quantification canonique</b> . . . . .  | 58  |
| 11 : Théorèmes d'Ehrenfest, quantification canonique . . . . .                   | 61  |
| 12 : Seconde quantification . . . . .  | 65  |
| 13 : Champ de photons, quantification du champ électromagnétique . . . . .       | 79  |
| <br>   |     |
| <b>Sections efficaces</b> . . . . .  | 85  |
| 14 : Etats de diffusion à 1d . . . . .   | 87  |
| 15 : Définition des sections efficaces . . . . .                                 | 91  |
| 16 : Sections efficaces et règle d'or . . . . .                                  | 93  |
| 17 : Equation intégrale de la diffusion . . . . .                                | 97  |
| 18 : Approximation de Born . . . . .   | 101 |
| 19 : Règle d'or de Fermi et approximation de Born . . . . .                      | 107 |
| 20 : Méthode des ondes partielles . . . . .                                      | 109 |
| <br>   |     |
| <b>Interactions photons-atomes</b> . . . . .                                     | 117 |

|   |     |
|---|-----|
| 21 : Approche classique de la diffusion élastique de la lumière . . . . . | 119 |
| 22 : Théorie de Rayleigh de la diffusion de la lumière . . . . .          | 127 |
| 23 : Absorption, émission, coefficients d'Einstein . . . . .              | 133 |
| 24 : Théorie de Wigner et Weisskopf de l'émission spontanée . . . . .     | 141 |
| 25 : Photo-ionisation de l'hydrogène . . . . .                            | 147 |
| 26 : Traitement quantique de la diffusion élastique . . . . .             | 149 |
| 27 : Electrodynamique en cavité . . . . .                                 | 151 |

## **Interactions électrons-atomes . . . . . 157**

|   |     |
|---|-----|
| 28 : Diffusion classique de particules alpha par un atome . . . . . | 159 |
| 29 : Diffusion élastique des électrons par un atome . . . . .       | 163 |
| 30 : Rayonnement de freinage . . . . .                              | 171 |
| 31 : Diffusion dépendant du spin . . . . .                          | 179 |

## **Interactions neutrons-atomes . . . . . 187**

|   |     |
|---|-----|
| 32 : Interactions neutrons-atomes . . . . . | 189 |
|---|-----|

**0**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

# Généralités

**2**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

# 1

## Intérêt de l'étude des interactions rayonnement-matière

### Mécanismes

Les interactions entre divers types de rayonnement et les atomes (noyaux, nuages électroniques ou bandes électroniques,...) qui constituent la matière (le plus souvent condensée) permettent de sonder la structure (ordre cristallographique, éventuellement ordre magnétique) et les propriétés (conductrices, magnétiques, acoustiques, etc...) des matériaux.

**Tableau 1.1** Les cas les plus fréquents de rayonnements employés pour étudier la matière condensée (la dernière colonne n'est pas ordonnée par rapport aux deux premières).

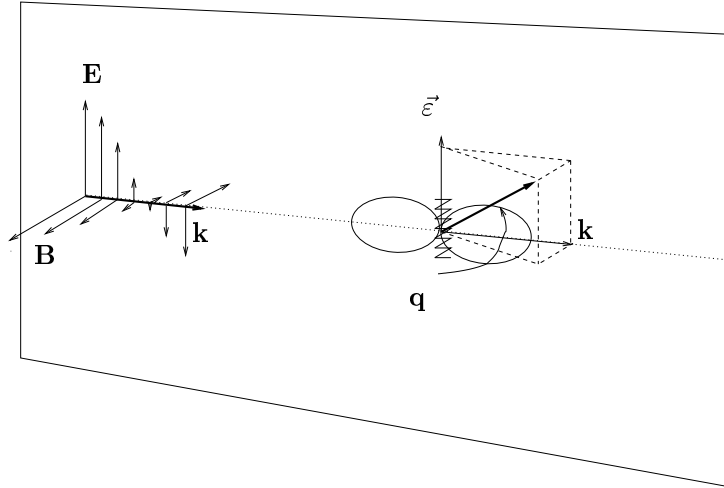
| Rayonnement | Mécanisme d'interaction       | Matière             |
|-------------|-------------------------------|---------------------|
| RX          | vibrations forcées            | solides cristallins |
|             | des charges                   | solides amorphes    |
| électrons   | interactions électrostatiques | quasi-cristaux      |
|             |                               | liquides            |
| neutrons    | interactions nucléaires       | surfaces            |
|             | et/ou magnétiques             | ...                 |

- i) Pour les RX, l'essentiel de l'interaction est dû aux nuages électroniques des atomes cibles. Classiquement, on considère les vibrations forcées des électrons élastiquement liés (modèle de Thomson) qui produisent une onde électromagnétique de même fréquence (diffusion Rayleigh à basse fréquence, diffusion Thomson à haute fréquence, fluorescence dans le régime intermédiaire). A haute fréquence, dans le régime Thomson, on néglige l'énergie de liaison des électrons, traités comme libres. A basse fréquence au contraire c'est le régime

# 4

Mis à jour le 11 Septembre 2007

Rayleigh et la fluorescence se produit à la résonance entre fréquence excitatrice et fréquence propre de vibration électronique.



En mécanique quantique, l'hamiltonien atomique est de la forme

$$H_{at} = \sum_{e^-} \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_{e^-} - q\mathbf{A})^2 + \dots = H_0 + \text{perturbations},$$

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle.$$

qui produit des termes du type

- terme paramagnétique :  $|q_e| \mathbf{p}_e \mathbf{A} / m$ ,
- terme diamagnétique :  $|q_e|^2 |\mathbf{A}|^2 / 2m, \dots$

$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  est le potentiel de l'onde incidente et  $q = -|q_e|$  la charge électronique. Si l'on tient compte du spin de l'électron, il convient d'ajouter un terme d'interaction en  $\frac{|q_e|}{2m} g \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ . Le terme paramagnétique traité au second ordre en perturbation explique la diffusion élastique Rayleigh alors que le terme diamagnétique au premier ordre est responsable de la diffusion Thomson. Les phénomènes inélastiques d'absorption - émission sont représentés par le terme paramagnétique au premier ordre. Des phénomènes tels que l'effet photoélectrique (dans l'UV) requièrent un état final ionisé possédant moins d'électrons que l'état initial, neutre. A très haute énergie (dans le domaine X), on est dans le régime de diffusion Compton où un électron est éjecté emportant un excédant d'énergie perdu par le photon diffusé et au-delà intervient le régime de création de paires électrons - positrons. Dans une expérience, l'ensemble de ces phénomènes se produisent simultanément, leurs importances respectives dépendant du domaine d'énergie. Le traitement peut se faire à différents niveaux d'approximation :

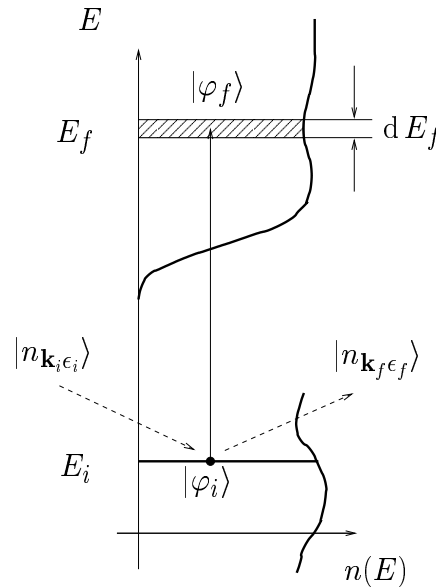
- théorie semi-classique (atome quantifié (la notion de niveaux d'énergie est capitale pour la compréhension de mécanismes tels que l'absorption et l'émission) - rayonnement classique). L'état (propre de  $H_0$ ) de l'atome passe au cours du processus d'un état initial à un état final d'énergie différente :



**Tableau 1.2** Approche semi-classique de l'interaction rayonnement électromagnétique-atome.

|             | état initial  | → | état final  |
|-------------|---|---|---|
| atome       | $\varphi_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}   \varphi_i \rangle, E_i$ | → | $\varphi_f(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}   \varphi_f \rangle, E_f$ |
| rayonnement | $\omega_i, \mathbf{k}_i$  | → | $\omega_f, \mathbf{k}_f$  |

En général  $E_f$  est différent de  $E_i$ , mais la conservation de l'énergie impose  $E_i + \hbar\omega_i = E_f + \hbar\omega_f$ .



- théorie quantique (le champ électromagnétique est également quantifié, ce qui permet d'élucider des questions liées à la cohérence ou à l'émission spontanée). L'état du système inclut cette fois l'atome et le champ :

**Tableau 1.3** Approche quantifiée de l'interaction photon-atome.

|         | état initial   | → | état final   |
|---------|--|---|--|
| système | $ i\rangle =  \varphi_i\rangle \otimes  n_{\mathbf{k}_i \varepsilon_i}\rangle$ | → | $ f\rangle =  \varphi_f\rangle \otimes  n_{\mathbf{k}_f \varepsilon_f}\rangle$ |
|         | $E_i + \hbar\omega_{\mathbf{k}_i}$   | → | $E_f + \hbar\omega_{\mathbf{k}_f}$   |

Ici,  $n_{\mathbf{k}_i \varepsilon_i}$  représente le nombre de photons dans le mode incident de vecteur d'onde et de polarisation déterminés.

L'outil de base dans les deux cas est la règle d'or de Fermi (qui permet d'étudier les transitions induites par des perturbations (ici  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ ) dépendant du temps).

- ii) Pour les électrons, c'est l'interaction coulombienne qui domine (avec le nuage électronique et le noyau) au travers de termes de la forme

## 6

Mis à jour le 11 Septembre 2007

$$U(\mathbf{r}) = -|q_e|\phi_{at}(\mathbf{r}),$$

$$\vec{\nabla}^2\phi_{at} = -\frac{1}{\varepsilon_0}(Z|q_e|\delta(\mathbf{r}) - |q_e|n(\mathbf{r})),$$

$$n(\mathbf{r}) = |\varphi_{e^-}(\mathbf{r})|^2.$$

Le traitement repose sur la théorie de la diffusion (approximation de Born pour les perturbations faibles, méthode des ondes partielles pour les perturbations sphériques). Dans ces théories les particules incidentes sont représentées par une onde plane  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  et les particules diffusées par une onde émergente  $\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ . La diffusion est caractérisée par une onde sphérique sortante modulée par une amplitude de diffusion

$$\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + f_{\mathbf{k}'}(\theta, \phi) \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{r}.$$

On rencontre pour l'amplitude de diffusion des notations assez diverses, notamment  $f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ,  $f(\theta, \phi)$ ,  $\frac{d^2f}{d^2\Omega}$  ou  $A(\theta, \phi)$ . Une sophistication supplémentaire (hors de propos ici) consiste à quantifier le champ électronique incident comme on l'a fait pour les photons.

- iii) Pour les neutrons, l'interaction forte a lieu avec le noyau. Le caractère localisé simplifie le traitement dans l'approximation de Born,

$$U(\mathbf{r}) = U_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sim \frac{2\pi\hbar^2}{mb^2},$$

où  $b$  est une amplitude de diffusion et  $a$  le rayon du noyau. Le moment magnétique du neutron permet aussi une interaction magnétique avec le spin atomique ou nucléaire.

### Sonder la structure de la matière

Ce sont des phénomènes de diffraction qui sont mis en œuvre : la cohérence de phase entre faisceaux (de RX par exemple) réfléchis par les plans cristallins conduit à des maxima dans les conditions de Bragg

$$2d \sin \theta_n = n\lambda$$

- i) La mesure des  $\theta_n$  (connaissant  $\lambda$ ) donne les distances entre plans atomiques responsables de la diffraction. Pour la lumière (RX),  $\lambda = c/\nu$ . Pour les électrons ou les neutrons,  $\lambda = h/\sqrt{2mE}$ . Ce sont des processus élastiques (conservation de l'énergie cinétique et de l'intégrité des particules mises en jeu).

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k},$$

$$E = \hbar\omega.$$

Pour les RX, on a la relation de dispersion

$$E = |\mathbf{p}|c \quad \text{ou} \quad \omega = c|\mathbf{k}|.$$

Pour les électrons ou les neutrons, on utilise la relation de dispersion des particules massives

$$E = |\mathbf{p}|^2/2m \quad \text{ou} \quad \omega = \hbar|\mathbf{k}|^2/2m.$$

La diffraction permet essentiellement de déterminer la distribution spatiale des centres diffuseurs. A haute résolution (grandes valeurs de  $|\mathbf{k}|$  dans l'espace réciproque pour accéder à de petits détails dans l'espace réel), cela permet par exemple de déterminer les densités de charges, voire dans le cas de la diffusion magnétique, des densités de spin.

### Sonder les propriétés de la matière

Ce sont les processus inélastiques (spectrométrie) qui sont cette fois mis en jeu. Une partie de l'énergie des particules incidentes sert à créer des excitations élémentaires (phonons, magnons, ... caractérisés par une pulsation  $\Omega$  et un vecteur de propagation  $\boldsymbol{\kappa}$ ) dans le milieu :

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \mathbf{p}' + \hbar\boldsymbol{\kappa}, \\ E &= E' + \hbar\Omega. \end{aligned}$$

Connaissant  $\mathbf{p}$  et  $E$ , les mesures de  $\mathbf{p}'$  et  $E'$  donnent accès à  $\boldsymbol{\kappa}$  et  $\Omega$  et permettent de reconstruire point par point la relation de dispersion des quasi-particules (neutrons thermiques), ou au moins leur densité d'états s'il n'y a pas de résolution spatiale (photons IR), et dans ce cas la densité d'états résulte de l'intégration des relations de dispersion dans l'espace des  $\mathbf{k}$ .

### Ordres de grandeur et sources de rayonnement

- i) Rayons X : dans le domaine optique, ce sont essentiellement les transitions atomiques radiatives qui produisent le rayonnement. Dans le domaine X, les raies intenses des sources standard proviennent des transitions atomiques radiatives de niveaux profonds (RX) ou des transitions nucléaires radiatives ( $\text{R}\gamma$  utilisés par exemple en spectrométrie Mössbauer). Le fond continu des lampes X provient du rayonnement de freinage. Dans les synchrotrons dédiés à la production de rayonnement (LURE, ESRF, Soleil...), on met à profit le rayonnement de freinage pour disposer de sources continues, intenses et polarisées de RX. Les ondes radio sont produites par des courants alternatifs dans des antennes.

Ordres de grandeur : Avec  $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ , soit  $E \text{ (en J)} = 1.6 \cdot 10^{-19} E \text{ (en eV)}$  et  $\lambda \text{ (en m)} = 10^{-10} \lambda \text{ (en \AA)}$ ,  $E = hc/\lambda$ , donne

$$E \text{ (en eV)} = \frac{12410}{\lambda \text{ (en \AA)}}, \quad \lambda \text{ (en \AA)} = \frac{12.41}{E \text{ (en keV)}}.$$

- ii) Electrons : la production se fait simplement par filaments chauffés. En raison de la charge électrique, la focalisation et la détection sont faciles. L'inconvénient correspondant est l'impossibilité de travailler sur des matériaux massifs (réflexion ou transmission sur lames minces).

Ordres de grandeur : dans le cas non relativiste,  $\lambda = h/|\mathbf{p}|$  et  $E = |\mathbf{p}|^2/2m$  donnent  $E = h^2/2m\lambda^2$ , soit

$$E \text{ (en eV)} = \frac{150}{\lambda^2 \text{ (en \AA)}}, \quad \lambda \text{ (en \AA)} = \frac{12.3}{\sqrt{E \text{ (en eV)}}}.$$

Avec les microscopes commerciaux les tensions accélératrices sont de 100 keV soit  $\lambda \simeq 0.04 \text{ \AA}$ .

- iii) Neutrons : les neutrons sont produits dans des réacteurs nucléaires (ILL à Grenoble, ORPHEE à Saclay), généralement thermalisés dans le graphite ou l'eau lourde. On obtient alors une distribution d'équilibre du type maxwellienne. Les neutrons interagissent très faiblement avec la matière. On les détecte par calorimétrie ou grâce à des réactions nucléaires produisant des protons, susceptibles par l'intermédiaire de leur charge, d'ioniser un milieu et donc de produire des charges détectables. Leur moment magnétique est un atout pour l'étude des structures magnétiques.

Ordres de grandeur : comme pour les électrons, on a

$$E \text{ (en eV)} = \frac{0.0817}{\lambda^2 \text{ (en \AA)}}, \quad \lambda \text{ (en \AA)} = \frac{0.28}{\sqrt{E \text{ (en eV)}}}.$$

Pour analyser les excitations élémentaires dans les solides (phonons, magnons, etc, ...) il faut des énergies de l'ordre de  $10^1 - 10^2 \text{ meV}$ , soit pour des photons des longueurs d'onde de l'ordre de  $\lambda_{\text{IR}} \simeq 100 \text{ \mu m}$ , pour les électrons, des valeurs proches de  $\lambda_{e^-} \simeq 100 \text{ \AA}$  et pour les neutrons,  $\lambda_n \simeq 3 \text{ \AA}$ . On constate que dans le cas des neutrons, c'est de l'ordre de grandeur des distances interatomiques de sorte que les neutrons permettent dans une même expérience de relier la structure (c'est-à-dire la distribution spatiale des centres diffuseurs) à la dynamique (dynamique des excitations élémentaires). Avec les photons, il faut un rayonnement X pour analyser la structure alors que c'est le domaine IR qui est adapté à l'étude de la dynamique.

**2****Notions de relativité****Quadrivecteurs**

La théorie de la relativité repose sur l'expression d'un invariant quadridimensionnel,

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2,$$

analogue à l'expression du théorème de Pythagore qui donne la distance (ici infinitésimale) entre deux points de l'espace euclidien. Les signes  $-$  qui apparaissent traduisent la nature un peu différente de l'espace-temps de la relativité (on parle de métrique de Minkowski). Pour permettre une généralisation de cet invariant à des espaces quelconques (ou simplement en restant dans l'espace de Minkowski, mais en travaillant avec les coordonnées locales et non plus cartésiennes), on introduit la notion de tenseur ou plus simplement d'abord de quadrivecteur contravariant (ou tenseur de rang 1 contravariant). En coordonnées cartésiennes, les composantes contravariantes du quadrivecteur sont simplement les composantes ordinaires, par exemple  $dx^\mu = (c dt, dx, dy, dz)$  et le jeu de 4 composantes <sup>(1)</sup>  $x^\mu$ ,  $\mu = 0, 1, 2, 3$  forme un quadrivecteur si ces 4 composantes obéissent par changement de référentiel inertiel <sup>(2)</sup> à la transformation de Lorentz :

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_{\nu} x^\nu,$$

---

<sup>(1)</sup> Un indice grec,  $\mu$  par exemple, court sur quatre valeurs, de 0 à 3. La composante 0 est aussi appelée composante temporelle et les trois autres composantes sont les composantes spatiales (on utilise parfois un indice latin,  $i$  par exemple, qui court alors de 1 à 3, ou bien la notation vectorielle).

<sup>(2)</sup> Par défaut, le changement de référentiel inertiel est toujours tel que le référentiel  $\mathcal{R}'$  se déplace à la vitesse  $\mathbf{u} = \beta c$  parallèlement à l'axe 1 (axe  $Ox$ , commun à  $Ox'$ ) par rapport au référentiel  $\mathcal{R}$ .

# 10

Mis à jour le 11 Septembre 2007

où la matrice de transformation de Lorentz est définie par

$$[\Lambda^\mu{}_\nu] = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Il est très important de noter quelques règles de lecture de la transformation ci-dessus : Lorsqu'un même indice apparaît comme c'est la cas ici en position haute et basse (on parle de positions contravariante et covariante), cela signifie qu'une somme sur les quatre valeurs permises pour cet indice est sous-entendue. C'est la convention de sommation des indices muets d'Einstein qui allège considérablement l'écriture. On dit que l'indice est contracté, il a donc explicitement disparu de l'expression considérée après sommation. Pour le reste, on doit voir apparaître des deux côtés de l'égalité les mêmes indices non contractés dans les mêmes positions, contravariantes ou covariantes. L'introduction de la matrice de transformation  $\Lambda^\mu{}_\nu$  est une commodité d'écriture. Si l'on note de manière très générale qu'un quadrivecteur  $x^\nu$  exprimé dans  $\mathcal{R}$ , il correspond un quadrivecteur  $x'^\mu$  exprimé dans  $\mathcal{R}'$ , et que celui-ci est une fonction de  $x^\nu$ , alors, si la transformation de l'un à l'autre est linéaire, le développement de Taylor de  $x'^\mu(x^\nu)$  ne laisse subsister que le terme du premier ordre,

$$x'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} x^\nu.$$

Pour que l'indice  $\nu$  soit en bonne position (covariante), on écrit aussi

$$\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \partial_\nu,$$

ce qui définit la dérivée covariante,  $\partial_\nu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right)$ . La justification d'un indice "en bas" est la suivante : une grandeur scalaire  $Q$  fonction des coordonnées d'espace-temps varie d'une quantité  $\delta Q = \frac{\partial Q}{\partial x^\mu} \delta x^\mu$  si les coordonnées varient. Pour assurer que  $\delta Q$  soit un scalaire, il faut contracter l'indice  $\mu$  et donc le terme  $\frac{\partial Q}{\partial x^\mu}$  doit avoir un indice covariant, c'est-à-dire s'écrire comme  $\partial_\mu Q$ .

L'origine de la transformation de Lorentz est à chercher dans la nécessité de trouver une loi de transformation des composantes spatio-temporelles qui généralise celle de Galilée,

$$\begin{aligned} ct' &= ct \\ x' &= -\beta ct + x \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}$$

devenue inacceptable car elle ne préserve pas la forme des équations de Maxwell et n'assure donc pas l'invariance des phénomènes liés à l'électromagnétisme par changement de référentiel inertiel. La généralisation cherchée doit être linéaire afin d'assurer que si le principe d'inertie est satisfait dans un référentiel donné, il le soit

automatiquement dans tout autre référentiel en translation uniforme par rapport au premier. De plus les composantes transverses doivent être inchangées dans la transformation <sup>(3)</sup>, on écrit donc en toute généralité

$$\begin{aligned} ct' &= Dct - Ex \\ x' &= -A\beta ct + Bx \end{aligned}$$

ce qui conduit à la transformation des vitesses sous la forme  $v'/c = \frac{Bv - A\beta c}{Dc - Ev}$ . Appliquée à l'origine de  $\mathcal{R}'$  ( $v' = 0$  et  $v = u$ ), à l'origine de  $\mathcal{R}$  ( $v' = -u$  et  $v = 0$ ) et à la lumière ( $v' = v = c$ ), on obtient trois contraintes soit,

$$\begin{aligned} ct' &= A(u)(ct - \beta x) \\ x' &= A(u)(-\beta ct + x) \end{aligned}$$

La quatrième contrainte est assurée par la condition  $A(-u) = A(u)$  (le signe de la vitesse est pris en compte dans  $\beta$ ), ce qui fait qu'en combinant cette transformation à la transformation inverse on obtient

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} &= A(u) \begin{pmatrix} 1 & -\beta \\ -\beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \\ &= A(u)A(-u) \begin{pmatrix} 1 & -\beta \\ -\beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ \beta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

qui impose  $A(u) = \gamma \equiv (1 - \beta^2)^{-1/2}$ .

Ayant maintenant défini un quadrivecteur contravariant comme la donnée de 4 composantes qui se transforment par changement de référentiel inertiel conformément à la transformation linéaire de Lorentz, on peut construire une norme à ce quadrivecteur, qui s'avère invariante par changement de référentiel inertiel, ce qui lui confère un rôle privilégié dans la théorie de la relativité. Reprenons le cas de l'intervalle. On a défini  $dx^\mu = (c dt, d\mathbf{r})$  et  $ds^2 = (c dt)^2 - |d\mathbf{r}|^2$ . Introduisant les composantes covariantes associées à  $dx^\mu$ , soit

$$dx_\mu = (c dt, -d\mathbf{r}),$$

on peut écrire

$$ds^2 = dx_\mu dx^\mu = (c dt)^2 - |d\mathbf{r}|^2.$$

On introduit encore le tenseur métrique qui fait passer des composantes contravariantes aux composantes covariantes,

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu} dx^\mu &= dx_\nu, \\ ds^2 &= g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \\ [g_{\mu\nu}] &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

<sup>(3)</sup> On note  $\mathbf{r}_\perp$  les coordonnées transverses à  $\mathbf{u}$ . La seule transformation acceptable est de la forme  $\mathbf{r}'_\perp = K(u)\mathbf{r}_\perp$  avec  $K(0) = 1$  et  $K(-u) = K(u)$  (ce sont des coordonnées transverses). On a donc  $\mathbf{r}'_\perp = K(u)\mathbf{r}_\perp = K(-u)K(u)\mathbf{r}'_\perp$ , soit  $K(-u)K(u) = K^2(u) = 1$ , ou en définitive  $K(u) = 1$ .

# 12

Mis à jour le 11 Septembre 2007

en coordonnées cartésiennes. On joue avec  $g_{\mu\nu}$  ou  $g^{\mu\nu}$  pour élever ou abaisser des indices, par exemple pour transformer les composantes covariantes

$$x'_\mu = \Lambda_\mu^\nu x_\nu = \frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\nu} x_\nu$$

avec  $\Lambda_\mu^\nu = g_{\mu\sigma} g^{\tau\nu} \Lambda^\sigma_\tau$ , ce qui revient à préserver la composante si l'on élève ou l'on abaisse une composante temporelle et à changer le signe s'il s'agit d'une composante spatiale. Il est clair que toute contraction (norme) d'un quadrivecteur,  $A_\mu A^\mu$  définit un scalaire invariant par transformation de Lorentz.

## Tenseurs

On généralise les notions précédentes à des objets ayant davantage de composantes. Ainsi par exemple, le jeu de 16 composantes  $A^{\mu\nu}$  obéissant par changement de référentiel inertiel à la transformation

$$A'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\sigma \Lambda^\nu_\tau A^{\sigma\tau}$$

définit un tenseur de rang 2 deux fois contravariant. De manière équivalente, le tenseur deux fois covariant associé se transforme comme

$$A'_{\mu\nu} = \Lambda_\mu^\sigma \Lambda_\nu^\tau A_{\sigma\tau}$$

et un tenseur mixte, comme

$$A'^\mu_\nu = \Lambda_\mu^\sigma \Lambda^\nu_\tau A^\sigma_\tau.$$

Il est bon de noter que tout objet muni d'indices ne forme pas nécessairement un tenseur. Par exemple  $\Lambda^\mu_\nu$  caractérise un changement de référentiel, mais pas une quantité physique dans un référentiel donné. De même, la loi de transformation étant linéaire si un objet n'a que des composantes nulles dans un référentiel inertiel, il doit en être de même dans tous s'il s'agit d'un tenseur.

## Définition des grandeurs physiques et expression covariante des lois physiques

Pour définir une quantité physique dans le formalisme tensoriel, il est naturel de partir d'une expression classique, par exemple vectorielle, puis d'en chercher la généralisation évidente sous forme de quadrivecteur. On peut ensuite écrire explicitement les composantes du quadrivecteur pour leur donner un sens. On obtient du même coup la loi de transformation des composantes et des invariants (par contraction) qui peuvent s'avérer très utiles. Prenons le cas de la vitesse,

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \longrightarrow v^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}.$$

Le temps n'étant plus un invariant, on a choisi de paramétrer la trajectoire (on parle de ligne d'univers) par le temps propre, tel qu'il s'écoule dans le référentiel propre de l'objet d'étude, défini par

$$ds^2 = dx_\mu dx^\mu = c^2 d\tau^2, \quad d\tau = dt \sqrt{1 - |\mathbf{v}|^2/c^2}$$



La quadrivitesse  $v^\mu$  est bien un tenseur de rang 1 car  $x^\mu$  en est un et  $\tau$  est un invariant. Ses composantes,  $c \frac{dt}{d\tau}$  et  $\frac{d\mathbf{x}}{d\tau}$  ou encore

$$v^\mu = (\gamma c, \gamma \mathbf{v}), \quad \gamma \equiv (1 - |\mathbf{v}|^2/c^2)^{-1/2}$$

se transforment comme  $v'^\mu = \Lambda^\mu_\nu v^\nu$ , ce qui conduit notamment à la loi habituelle de composition des vitesses qui remplace celle de Galilée. L'invariant associé est  $v_\mu v^\mu = \frac{dx_\mu}{d\tau} \frac{dx^\mu}{d\tau} = c^2$ .

On peut maintenant généraliser  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  pour définir le quadrivecteur énergie-impulsion,

$$p^\mu = mv^\mu = (\gamma mc, \gamma m\mathbf{v})$$

dont la première composante est homogène à une énergie divisée par  $c$ ,  $p^0 = E/c$  et de sorte que l'on ait d'une part la loi de transformation,  $p'^\mu = \Lambda^\mu_\nu p^\nu$  et d'autre part l'invariant très important,

$$p_\mu p^\mu \equiv E^2/c^2 - |\mathbf{p}|^2 = m^2 c^2.$$

Cette quantité est utile en particulier dans l'étude des collisions, où la quadri-impulsion totale se conserve. Traitons l'exemple de l'effet Compton. Un photon incident <sup>(4)</sup>,  $p^\mu = (|\mathbf{p}|, \mathbf{p})$ , arrive sur un électron au repos dans le référentiel de travail,  $q^\mu = (mc, \vec{0})$ . Après collision, le photon a une impulsion  $P^\mu = (|\mathbf{P}|, \mathbf{P})$  et l'électron  $Q^\mu = (\gamma mc, \gamma m\mathbf{v})$ . L'équation de conservation  $p^\mu + q^\mu = P^\mu + Q^\mu$  s'écrit aussi  $Q^\mu = p^\mu + q^\mu - P^\mu$  et l'invariant associé vaut

$$\underbrace{Q_\mu Q^\mu}_{m^2 c^2} = \underbrace{p_\mu p^\mu}_0 + \underbrace{q_\mu q^\mu}_{m^2 c^2} + \underbrace{P_\mu P^\mu}_0 + 2 \underbrace{p_\mu q^\mu}_{mc|\mathbf{p}|} - 2 \underbrace{p_\mu P^\mu}_{|\mathbf{p}| \cdot |\mathbf{P}| - \mathbf{p} \cdot \mathbf{P}} - 2 \underbrace{q_\mu P^\mu}_{mc|\mathbf{P}|}.$$

On en déduit

$$mc(|\mathbf{p}| - |\mathbf{P}|) = |\mathbf{p}| \cdot |\mathbf{P}| - \mathbf{p} \cdot \mathbf{P}$$

$$\frac{1}{|\mathbf{P}|} - \frac{1}{|\mathbf{p}|} = \frac{1}{mc} (1 - \cos(\mathbf{p}, \mathbf{P})).$$

Exprimées à l'aide des tenseurs, les lois physiques prennent une forme dite *manifestement covariante* car leur validité est assurée dans tout référentiel inertiel, moyennant les règles de transformation des tenseurs. Un exemple est fourni par la généralisation de la loi fondamentale de la dynamique que l'on écrit

$$m \frac{dv^\mu}{d\tau} = \Phi^\mu$$

où  $\Phi^\mu$  définit la quadri-force,  $\Phi^\mu = \gamma \frac{d}{dt} (E/c, \mathbf{p})$ , soit  $\Phi^0 = \frac{\gamma}{c} \frac{dE}{dt}$  et  $\vec{\Phi} = \gamma \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \gamma \mathbf{F}$ . La loi de transformation s'ensuit également,  $\Phi'^\mu = \Lambda^\mu_\nu \Phi^\nu$ .

<sup>(4)</sup> Le photon ayant une masse nulle,  $p_\mu p^\mu = 0$  entraîne  $E = |\mathbf{p}|c$ .

**Formulation covariante de l'électromagnétisme**

Les lois de l'électromagnétisme prennent également une forme plus élégante et compacte à l'aide de la notation tensorielle. Commençons par la loi de conservation de la charge,

$$\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

Si elle vaut pour un système donné étudié dans un certain référentiel, on souhaite évidemment qu'elle soit vraie aussi pour tout autre observateur. La forme de cette équation suggère l'introduction du quadrivecteur  $j^\mu = (\rho c, \mathbf{j})$ , qui n'est rien d'autre que la généralisation de  $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$  de sorte que

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial \rho c}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Le fait que cette expression soit une contraction nous assure de sa validité dans tous les référentiels inertiels. C'est une expression *manifestement covariante*. Pour les potentiels on procède de manière analogue. On sait que les équations de Maxwell dans le vide,

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= \rho / \epsilon_0 \\ \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

et la relation entre champs et potentiels,

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\vec{\nabla} \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} &= \operatorname{rot} \mathbf{A}. \end{aligned}$$

entraînent les équations de propagation des potentiels,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{j} \\ \vec{\nabla}^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} &= -\rho / \epsilon_0. \end{aligned}$$

si l'on impose la jauge de Lorenz-Lorentz <sup>(5)</sup>

$$\operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0.$$

---

<sup>(5)</sup> Cette relation, très importante puisqu'il s'agit d'une jauge covariante, est due au danois Ludvig Valentin Lorenz, mais elle fut popularisée par un quasi-homonyme, le physicien hollandais incontournable, Hendrik Antoon Lorentz, auquel l'usage en a attribué la paternité.

La forme même de la jauge de Lorenz suggère l'introduction d'un quadripotentiell

$$A^\mu = (\phi/c, \mathbf{A})$$

de sorte qu'elle apparaisse comme une contraction invariante,

$$\partial_\mu A^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\phi}{c} \right) + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0.$$

Les équations de propagation s'obtiennent de même de manière covariante au moyen de l'opérateur d'Alembertien,

$$\begin{aligned} \partial_\mu &= \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) \\ \partial^\mu &= \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) \\ \partial_\mu \partial^\mu &= \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}, -\vec{\nabla}^2 \right) \end{aligned}$$

soit

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu = \mu_0 j^\nu, \quad \mu_0 = 1/\varepsilon_0 c^2.$$

On cherche ensuite à définir un tenseur représentant le champ électromagnétique (qu'on appelle souvent tenseur de Faraday). On sait que  $A^\mu$  est un 4-vecteur. Par ailleurs la relation  $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$  contient des termes de la forme

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}$$

qui suggèrent de définir un tenseur de rang 2 antisymétrique

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu.$$

On a trivialement des zéros sur la diagonale,  $F^{00} = F^{ii} = 0$  et  $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$  ou encore  $F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$ . Les composantes non nulles du tenseur deux fois contravariant <sup>(6)</sup> s'expriment explicitement en fonction des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ .

<sup>(6)</sup> Le tenseur deux fois covariant

$$F_{\mu\nu} = g_{\mu\sigma} g_{\nu\tau} F^{\sigma\tau}$$

s'en déduit en conservant le signe de  $F_{00} = F^{00}$  et des composantes purement spatiales,  $F_{ij} = F^{ij}$  et en changeant le signe des composantes mixtes  $F_{0j} = -F^{0j}$  :

$$[F_{\mu\nu}] = \begin{pmatrix} 0 & E_x/c & E_y/c & E_z/c \\ -E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}.$$

# 16

Mis à jour le 11 Septembre 2007

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = \frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu}.$$

$$[F^{\mu\nu}] = \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}.$$

On définit également un tenseur champ électromagnétique dual <sup>(7)</sup>

Utilisant les règles de transformation des tenseurs, on obtient aisément les transformations des champs électromagnétiques par changement de référentiel inertiel.  $F^{\mu\nu}$  étant un tenseur de rang deux, deux fois contravariant, il se transforme par définition selon

$$F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\sigma \Lambda^\nu_\tau F^{\sigma\tau},$$

et sous forme condensée on écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_{\parallel} &= \mathbf{E}_{\parallel}, \\ \mathbf{B}'_{\parallel} &= \mathbf{B}_{\parallel}, \\ \mathbf{E}'_{\perp} &= \gamma_{\mathbf{u}}(\mathbf{E}_{\perp} + \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{u}}c \wedge \mathbf{B}_{\perp}) \\ \mathbf{B}'_{\perp} &= \gamma_{\mathbf{u}}(\mathbf{B}_{\perp} - (\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{u}}/c) \wedge \mathbf{E}_{\perp}). \end{aligned}$$

En réalisant des contractions sur tous les indices, on obtient les invariants du champ électromagnétique :

$$-\frac{1}{2}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = \mathbf{E}^2/c^2 - \mathbf{B}^2, \quad -\frac{1}{4}\bar{F}^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}/c.$$

---

<sup>(7)</sup> Celui-ci est formé au moyen du tenseur de Levi-Civita

$$\epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} = \begin{cases} +1 & \text{si } \mu, \nu, \sigma, \tau = 0, 1, 2, 3 \text{ et permutations paires} \\ -1 & \text{si permutations impaires} \\ 0 & \text{si deux indices ou plus sont égaux} \end{cases}$$

En particulier on a  $\epsilon_{\mu\nu\sigma\tau} = -\epsilon^{\mu\nu\sigma\tau}$ . On définit le tenseur dual  $\bar{F}^{\mu\nu}$  par la contraction

$$\bar{F}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\sigma\tau}F_{\sigma\tau}.$$

Ses composantes s'obtiennent à partir de celles de  $F^{\mu\nu}$  en changeant  $\mathbf{E}/c$  en  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{B}$  en  $-\mathbf{E}/c$  :

$$[\bar{F}^{\mu\nu}] = \begin{pmatrix} 0 & -B_x & -B_y & -B_z \\ B_x & 0 & E_z/c & -E_y/c \\ B_y & -E_z/c & 0 & E_x/c \\ B_z & E_y/c & -E_x/c & 0. \end{pmatrix}$$

Pour obtenir les équations de Maxwell covariantes, construisons les quantités  $\partial_\mu F^{\mu\nu}$ . Pour  $\nu = 0$ , on a

$$\begin{aligned}\partial_\mu F^{\mu 0} &= \partial_0 F^{00} + \partial_1 F^{10} + \partial_2 F^{20} + \partial_3 F^{30} \\ &= 0 + \frac{\partial}{\partial x}(E_x/c) + \frac{\partial}{\partial y}(E_y/c) + \frac{\partial}{\partial z}(E_z/c) \\ &= \frac{1}{c} \operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \rho c \\ &= \mu_0 j^0.\end{aligned}$$

Pour  $\nu = 1$ , on a de même

$$\begin{aligned}\partial_\mu F^{\mu 1} &= \partial_0 F^{01} + \partial_1 F^{11} + \partial_2 F^{21} + \partial_3 F^{31} \\ &= \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}(-E_x/c) + 0 + \frac{\partial}{\partial y} B_z + \frac{\partial}{\partial z}(-B_y) \\ &= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t} + (\operatorname{rot} \mathbf{B}) \mathbf{u}_x \\ &= \mu_0 j^1,\end{aligned}$$

et les deux dernières composantes spatiales s'en déduisent par permutation. On a donc

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu, \quad (2.1)$$

expression qui regroupe les deux équations de Maxwell avec sources,

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{j}.\end{aligned} \quad (2.2)$$

Le second couple d'équations de Maxwell s'obtient plus aisément après l'introduction du tenseur champ électromagnétique dual. Examinons la contraction  $\partial_\mu \bar{F}^{\mu\nu}$ . Pour  $\nu = 0$ , on a

$$\begin{aligned}\partial_\mu \bar{F}^{\mu 0} &= \partial_0 \bar{F}^{00} + \partial_1 \bar{F}^{10} + \partial_2 \bar{F}^{20} + \partial_3 \bar{F}^{30} \\ &= 0 + \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} \\ &= \operatorname{div} \mathbf{B}.\end{aligned}$$

Pour  $\nu = 1$ , on a de même

$$\begin{aligned}\partial_\mu \bar{F}^{\mu 1} &= \partial_0 \bar{F}^{01} + \partial_1 \bar{F}^{11} + \partial_2 \bar{F}^{21} + \partial_3 \bar{F}^{31} \\ &= \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}(-B_x) + 0 + \frac{\partial}{\partial y}(-E_z/c) + \frac{\partial}{\partial z}(E_y/c) \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial B_x}{\partial t} - \frac{1}{c} (\operatorname{rot} \mathbf{E}) \mathbf{u}_x.\end{aligned}$$

# 18

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

On en déduit l'expression unifiée du second couple d'équations de Maxwell, les équations sans second membre,

$$\partial_\mu \bar{F}^{\mu\nu} = 0. \quad (2.3)$$

Les équations de Maxwell manifestement covariantes s'écrivent donc :

$$\begin{aligned} \partial_\mu F^{\mu\nu} &= \mu_0 j^\nu, \\ \partial_\mu \bar{F}^{\mu\nu} &= \partial_\mu F^{\nu\lambda} + \partial_\nu F^{\lambda\mu} + \partial_\lambda F^{\mu\nu} = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

**3****Rayonnement de la charge accélérée****Charge en mouvement uniforme**

On considère le cas d'une charge  $q$  animée d'un mouvement à vitesse constante  $\mathbf{v}$  dans un référentiel inertiel  $\mathcal{R}$ . On se propose de calculer les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  par transformation de Lorentz. La vitesse de la particule définit l'axe  $Ox$ ,  $\mathbf{v} = v \hat{\mathbf{x}}$ . Dans le référentiel  $\mathcal{R}'$ , solidaire du mouvement de la charge et dont les axes coïncident à un instant donné avec ceux de  $\mathcal{R}$ , le champ est purement coulombien,

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}') = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}'}{r'^3},$$

$$\mathbf{B}'(\mathbf{r}') = \vec{0}.$$

On sait par ailleurs passer des coordonnées exprimées dans  $\mathcal{R}'$  à celles dans  $\mathcal{R}$  par une simple transformation de Lorentz, puisque ces deux référentiels sont inertiels,

$$ct' = \gamma(ct - \beta x)$$

$$x' = \gamma(-\beta ct + x)$$

$$y' = y$$

$$z' = z$$

de même que l'on sait transformer les composantes des champs,

Mis à jour le 11 Septembre 2007

$$\begin{aligned}
 E'_x &= E_x \\
 E'_y &= \gamma(E_y - \beta c B_z) \\
 E'_z &= \gamma(E_z + \beta c B_y) \\
 B'_x &= B_x \\
 B'_y &= \gamma(B_y + (\beta/c) E_z) \\
 B'_z &= \gamma(B_z - (\beta/c) E_y).
 \end{aligned}$$

Calculons alors les composantes des champs dans  $\mathcal{R}$  à l'instant  $t = 0$ . Pour cela on exprime les transformations inverses,

$$\begin{aligned}
 E_x &= E'_x \\
 E_y &= \gamma(E'_y + \beta c B'_z) \\
 E_z &= \gamma(E'_z - \beta c B'_y)
 \end{aligned}$$

avec les composantes de  $\mathbf{B}'$  nulles, soit

$$\begin{aligned}
 E_x &= E'_x = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma x}{(\gamma^2 x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}}, \\
 E_y &= \gamma E'_y = \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{y}{(\gamma^2 x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}}, \\
 E_z &= \gamma E'_z = \gamma \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{z}{(\gamma^2 x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}}.
 \end{aligned}$$

Si l'on note  $\theta$  l'angle entre  $\mathbf{v}$  et la direction d'observation,  $x = r \cos \theta$ ,  $y^2 + z^2 = r^2 \sin^2 \theta$ , soit

$$\gamma^2 x^2 + y^2 + z^2 = \gamma^2 r^2 (1 - \beta^2 \sin^2 \theta)$$

et on peut écrire vectoriellement

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, 0) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(1 - \beta^2) \mathbf{r}}{r^3 (1 - \beta^2 \sin^2 \theta)^{3/2}}. \quad (3.1)$$

On constate que le champ électrique est centré sur la position instantanée de la charge, sans effet de retard, ce qui est remarquable et qu'il est coulombien à l'ordre dominant.

Le calcul du champ magnétique est plus simple si l'on utilise la forme vectorielle de la transformation des champs,

$$\mathbf{B}'_{\perp} = \gamma(\mathbf{B}_{\perp} - (\beta/c) \wedge \mathbf{E}_{\perp}) = \vec{0},$$

soit

$$\mathbf{B}_{\perp} = (\beta/c) \wedge \mathbf{E}_{\perp} = \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \wedge \mathbf{E}.$$

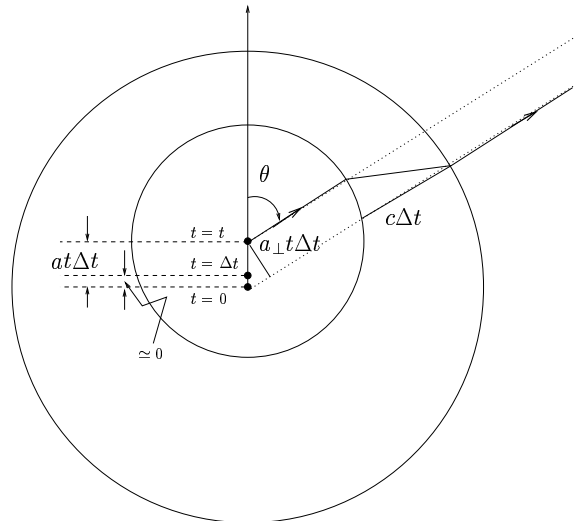


On a aussi  $\mathbf{B}'_{\parallel} = \mathbf{B}_{\parallel} = \vec{0}$ , d'où

$$\mathbf{B} = (\beta/c) \wedge \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \wedge \mathbf{E}.$$

### Calcul approché du champ électrique rayonné

Une méthode simplifiée de calcul du champ électrique rayonné par la charge accélérée, due à Thomson, est basée sur le résultat précédent, à savoir que dans la limite faiblement relativiste, le champ électrique est coulombien et centré sur la position instantanée de la charge. On considère alors la charge immobile à l'origine à  $t = 0$ . Elle subit une accélération  $\mathbf{a}$  constante pendant la durée infinitésimale  $\Delta t$ , acquiert ainsi une vitesse  $\mathbf{v} = \mathbf{a}\Delta t$  à laquelle elle se déplace à vitesse constante jusqu'au temps  $t$  auquel on calcule le champ. On se place dans la limite  $\Delta t \ll t$  et  $|\mathbf{a}|\Delta t \ll c$ .



A des distances inférieures à  $r = ct$  (dans une *sphère d'information*), le champ est coulombien et centré sur la position actuelle de la charge comme on l'a dit. On note  $\mathbf{u}_{\parallel}$  et  $\mathbf{u}_{\perp}$  les vecteurs unitaires parallèlement et perpendiculairement à la direction d'observation (on introduit aussi les notations  $\mathbf{u}_r$  et  $\mathbf{u}_{\theta}$ ). On a ainsi

$$E_{\parallel} \simeq \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^2}.$$

Au-delà de la distance  $c(t+\Delta t) \simeq ct$ , le champ est également coulombien, mais centré sur la position originale de la particule car l'information qu'elle a été accélérée n'est pas encore parvenue dans cette région. Une simple construction géométrique illustrée sur la figure ci-dessus conduit à la règle de proportionnalité

$$\frac{E_{\perp}}{E_{\parallel}} = \frac{a_{\perp} t \Delta t}{c \Delta t},$$

soit à l'ordre dominant

$$E_{\perp} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_{\perp}}{rc^2},$$

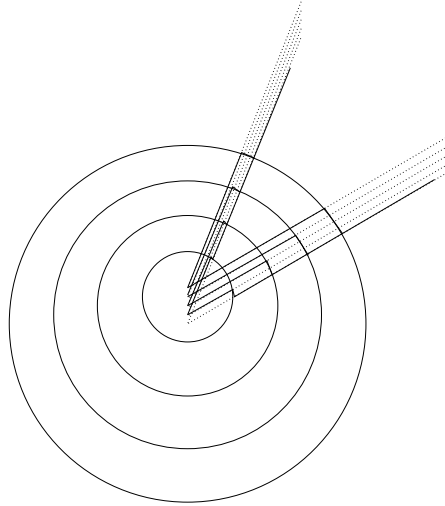
que l'on écrit en général en fonction de l'accélération retardée, puisqu'à l'instant  $t$  la charge n'est plus accélérée,

$$E_{\perp} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_{\perp}(t-r/c)}{rc^2}.$$

Le champ rayonné est polarisé dans le plan  $(\mathbf{a}, \mathbf{n})$  (ici  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  représente le vecteur unitaire dans la direction d'observation) et bien entendu perpendiculairement à  $\mathbf{n}$ . Il est ainsi porté par  $\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{a})$ , soit

$$\mathbf{E}_R = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{a})}{rc^2} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{a})}{r^3c^2}.$$

L'aspect rayonnement est illustré par la figure ci-dessous qui représente le développement temporel de la composante  $a_{\perp}t\Delta t$  et sa dépendance angulaire (ici,  $\Delta t$  est totalement négligé).



### Quadripotentiel associé à la charge en mouvement arbitraire

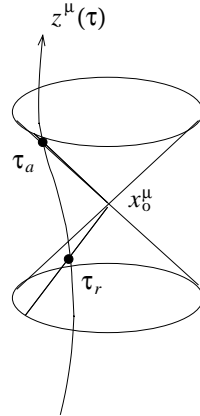
On considère une charge  $q$  animée d'un mouvement arbitraire par rapport à un observateur situé en  $\mathbf{r}_0$ . À l'instant  $t_0$  (mesuré dans son propre référentiel), le champ électromagnétique ressenti est celui de la charge lorsqu'elle était à la position retardée  $\mathbf{r}_q(t_r)$  telle que

$$|\mathbf{r}_q(t_r) - \mathbf{r}_0| = c(t_0 - t_r)$$

en raison de la vitesse finie de propagation des interactions électromagnétiques. On introduit pour la suite la notation  $\mathbf{R}(t_r) = \mathbf{r}_q(t_r) - \mathbf{r}_0$  et la notation quadridimensionnelle associée,  $R_\sigma(t_r) = (c(t_0 - t_r), -\mathbf{R}(t_r))$ . Ce quadrivecteur est par définition du genre lumière, puisque

$$R_\sigma(t_r)R^\sigma(t_r) = c^2(t_0 - t_r)^2 - |\mathbf{R}(t_r)|^2.$$

Dans la notation tensorielle, on appelle  $x_0^\mu$  la quadriposition de l'observateur et  $z^\mu(t)$  celle de la charge.



Pour trouver la forme du quadripotential  $A^\mu(x_0^\nu)$  au point  $\mathbf{r}_0, t_0$  dans le référentiel lié à l'observateur, on utilise la covariance des expressions tensorielles, c'est-à-dire que l'on se place tout d'abord dans le référentiel propre de la charge (le temps propre dans ce référentiel  $\mathcal{R}'$  qui accompagne la charge dans son mouvement est noté  $\tau$  et les quantités exprimées dans ce référentiel sont notées avec des primes) où le quadripotential prend une expression simplifiée, puisque seule la partie temporelle est non nulle. On exprime cette partie temporelle sous forme manifestement covariante (c'est-à-dire comme un tenseur contravariant de rang 1) et l'expression correspondante dans le référentiel original en découle immédiatement.

Dans le référentiel propre de la charge, le quadripotential se réduit à la partie électrostatique, soit

$$\phi'(\mathbf{r}'_0, \tau_0) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{R}'(\tau_r)|}.$$

Comme on a dans  $\mathcal{R}'$ , tout comme dans  $\mathcal{R}$  d'ailleurs,

$$R'_\sigma(\tau_r)R'^\sigma(\tau_r) = c^2(\tau_0 - \tau_r)^2 - |\mathbf{R}'(\tau_r)|^2,$$

où  $R'^\sigma(\tau_r) = (c(\tau_0 - \tau_r), \mathbf{R}'(\tau_r))$ , on peut écrire  $|\mathbf{R}'(\tau_r)| = c(\tau_0 - \tau_r)$  et

$$\frac{1}{c}\phi'(\mathbf{r}'_0, \tau_0) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2(\tau_0 - \tau_r)}. \quad (3.2)$$

Dans ce même référentiel, on note que

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}'_0, \tau_0) = \vec{0}.$$

Le point essentiel est que dans le référentiel  $\mathcal{R}'$ , le quadripotentiel n'a qu'une partie temporelle non nulle, il doit donc être proportionnel à la quadrivitesse qui, dans ce même référentiel, prend la forme simplifiée  $v'^{\mu}(\tau) = (c, \vec{0})$ . C'est de plus compatible avec l'exigence d'obtenir pour  $A'^{\mu}$  un tenseur contravariant de rang 1. Il faut alors faire également apparaître la quadrivitesse au dénominateur pour des raisons dimensionnelles, mais dans une contraction pour obtenir un scalaire au dénominateur. On forme ainsi la quantité

$$\frac{v'^{\mu}(\tau_r)}{v'_{\sigma}(\tau_r)R'^{\sigma}(\tau_r)} = \left( \frac{c}{c^2(\tau_0 - \tau_r)}, \vec{0} \right)$$

qui permet d'écrire

$$A'^{\mu}(x'_0) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 c} \frac{v'^{\mu}(\tau_r)}{v'_{\sigma}(\tau_r)R'^{\sigma}(\tau_r)} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 c} \frac{[v'^{\mu}]_{ret.}}{[v'_{\sigma}R'^{\sigma}]_{ret.}},$$

où la notation fréquemment employée  $[\dots]_{ret.}$  signifie que la quantité entre crochets est évaluée au temps retardé.

L'intérêt de cette expression est évident : il s'agit d'une forme tensorielle, donc covariante par changement de référentiel inertiel, elle se généralise immédiatement à tout autre référentiel inertiel, en particulier  $\mathcal{R}$ .

$$A^{\mu}(x_0) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 c} \frac{v^{\mu}(t_r)}{v_{\sigma}(t_r)R^{\sigma}(t_r)} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 c} \frac{[v^{\mu}]_{ret.}}{[v_{\sigma}R^{\sigma}]_{ret.}}.$$

En exprimant dans  $\mathcal{R}$  les composantes de  $v^{\mu}$  et le produit invariant  $v_{\sigma}R^{\sigma}$ , (il n'y a pas d'ambiguïté ici, on notera donc  $\gamma$  pour  $\gamma$ )

$$\begin{aligned} v^{\sigma}(t_r) &= (\gamma c, \gamma \mathbf{v}(t_r)) \\ R^{\sigma}(t_r) &= (c(t_0 - t_r), \mathbf{R}(t_r)) \\ v_{\sigma}(t_r)R^{\sigma}(t_r) &= \gamma c^2(t_0 - t_r) - \gamma \mathbf{v}(t_r) \cdot \mathbf{R}(t_r) \\ &= \gamma(|\mathbf{R}(t_r)|c - \mathbf{R}(t_r) \cdot \mathbf{v}(t_r)). \end{aligned}$$

on obtient la forme explicite du potentiel électrostatique et du potentiel vecteur dans le référentiel de l'observateur,

$$A^{\mu}(\mathbf{r}_0, t_0) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 c} \left( \frac{c}{|\mathbf{R}(t_r)|c - \mathbf{R}(t_r) \cdot \mathbf{v}(t_r)}, \frac{\mathbf{v}(t_r)}{|\mathbf{R}(t_r)|c - \mathbf{R}(t_r) \cdot \mathbf{v}(t_r)} \right)$$

$$\phi(\mathbf{r}_0, t_0) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{R}(t_r)|} (1 - \mathbf{R}(t_r) \cdot \mathbf{v}(t_r) / |\mathbf{R}(t_r)|c)^{-1}$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t_0) = \frac{q \mathbf{v}(t_r)}{4\pi\varepsilon_0 c^2 |\mathbf{R}(t_r)|} (1 - \mathbf{R}(t_r) \cdot \mathbf{v}(t_r) / |\mathbf{R}(t_r)|c)^{-1}.$$

Ces potentiels sont connus sous le nom de potentiels de Liénard-Wiechert<sup>(8)</sup>.

<sup>(8)</sup> Ces potentiels ont été obtenus indépendamment avant l'élaboration de la relativité restreinte par Liénard en 1898 et par Wiechert en 1900.

**Tenseur champ électromagnétique  $F^{\mu\nu}$** 

Le formalisme tridimensionnel, on l'a vu au paragraphe précédent, est lourd à manipuler et les calculs sont finalement plus simples s'ils sont menés à l'aide du formalisme covariant<sup>(9)</sup>. On calcule les dérivées à l'instant retardé

$$[\partial^\mu A^\nu]_{ret.} = \frac{\mu_0 q}{4\pi} \left[ \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \frac{v^\nu}{\rho} \right) \right]_{ret.},$$

où l'on a posé

$$\rho = v_\sigma R^\sigma / c.$$

On développe la dérivée

$$\begin{aligned} [\partial^\mu A^\nu]_{ret.} &= \frac{\mu_0 q}{4\pi} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial v^\nu}{\partial x_\mu} + v^\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \frac{1}{\rho} \right) \right]_{ret.} \\ &= \frac{\mu_0 q}{4\pi} \left[ \frac{1}{\rho} \partial^\mu v^\nu + v^\nu \partial^\mu \left( \frac{1}{\rho} \right) \right]_{ret.}, \end{aligned}$$

puis on utilise

$$\begin{aligned} \partial^\mu v^\nu &= \frac{\partial v^\nu}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x_\mu} = a^\nu \partial^\mu \tau \\ \partial^\mu \left( \frac{1}{\rho} \right) &= \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{1}{\rho} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x_\mu} = -\frac{1}{\rho^2} \partial^\mu \rho, \end{aligned}$$

il vient ensuite

$$[\partial^\mu A^\nu]_{ret.} = \frac{\mu_0 q}{4\pi} \left( [a^\nu \partial^\mu \tau]_{ret.} - \frac{1}{[\rho^2]_{ret.}} [\partial^\mu \rho]_{ret.} \right),$$

d'où l'on déduit le tenseur champ électromagnétique au point d'observation en fonction de la position retardée de la charge.

$$\begin{aligned} F^{\mu\nu}(x_0^\sigma) &= \frac{\mu_0 q}{4\pi} ([a^\nu \partial^\mu \tau]_{ret.} - [a^\mu \partial^\nu \tau]_{ret.} \\ &\quad - [\partial^\mu \rho]_{ret.} / [\rho^2]_{ret.} + [\partial^\nu \rho]_{ret.} / [\rho^2]_{ret.}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

On peut exprimer le champ électrique

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t_0) &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 [|\mathbf{R}|^2]_{ret.}} (1 - [\boldsymbol{\beta} \hat{\mathbf{u}}_R]_{ret.})^{-3} \\ &\quad \times \left[ (1 - |\boldsymbol{\beta}|^2) (\hat{\mathbf{u}}_R - \boldsymbol{\beta}) + \frac{|\mathbf{R}|}{c^2} (\mathbf{a} \hat{\mathbf{u}}_R (\hat{\mathbf{u}}_R - \boldsymbol{\beta}) - \mathbf{a} (1 - \boldsymbol{\beta} \hat{\mathbf{u}}_R)) \right]_{ret.}, \end{aligned}$$

<sup>(9)</sup> On en trouve l'exposé détaillé dans F. Rohrlich, Classical charged particles, Addison-Wesley, Redwood 1965, section 4-8, p. 83.

et en utilisant  $\mathbf{a}\hat{\mathbf{u}}_R = a_{\parallel}$  et  $\mathbf{a} - (\mathbf{a}\hat{\mathbf{u}}_R)\hat{\mathbf{u}}_R = \mathbf{a}_{\perp}$  et de même pour les composantes de  $\boldsymbol{\beta}$  on obtient

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t_0) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0[|\mathbf{R}|^2]_{ret.}(1 - [\boldsymbol{\beta}\hat{\mathbf{u}}_R]_{ret.})^3} \times \left[ (1 - |\boldsymbol{\beta}|^2)(\hat{\mathbf{u}}_R - \boldsymbol{\beta}) - \frac{|\mathbf{R}|}{c^2}(\mathbf{a}_{\perp} - a_{\parallel}\boldsymbol{\beta} - \beta_{\parallel}\mathbf{a}) \right]_{ret.}. \quad (3.4)$$

Le champ total est constitué d'une partie statique et d'une partie proportionnelle à la vitesse retardée, toutes deux décroissant rapidement en  $1/R^2$  et d'une partie faisant intervenir l'accélération, décroissant bien plus lentement en  $1/R$  et qui constitue le champ de rayonnement. Les expressions précédentes du champ  $\mathbf{E}$  sont dues à Liénard et Wiechert. Il existe également une autre forme, due à Heaviside et Feynman<sup>(10)</sup>,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t_0) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{\hat{\mathbf{u}}_R}{|\mathbf{R}|^2} + \frac{|\mathbf{R}|}{c} \frac{d}{dt} \frac{\hat{\mathbf{u}}_R}{|\mathbf{R}|^2} + \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \hat{\mathbf{u}}_R \right).$$

---

<sup>(10)</sup> L. Eyges, *The classical electromagnetic field*, Dover, New York 1972, p. 281 et R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, *The Feynman lectures on physics*, vol. I chap. 28 et vol. II chap. 21, Addison-Wesley, Reading 1977.

## 4

# Champ électromagnétique classique dans une cavité

On se propose de décrire le champ électromagnétique dans une cavité cubique  $L^3$  avec conditions aux limites périodiques. Les valeurs permises par les vecteurs d'ondes sont de la forme  $\mathbf{q} = \frac{2\pi}{L}(\ell, m, n)$ ,  $\ell, m, n \in \mathbb{Z}$ . En jauge de Coulomb et en l'absence de distribution statique de charges, les potentiels satisfont à  $\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$  et  $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ . On décompose le potentiel vecteur en série de Fourier :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} [\mathbf{A}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \cos \mathbf{q}\mathbf{r} + \mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \sin \mathbf{q}\mathbf{r}],$$

où  $\mathbf{A}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t)$  et  $\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t)$  sont les modes de Fourier réels (les amplitudes des modes) et la décomposition porte sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  et les deux états de polarisation  $\varepsilon = \varepsilon_1, \varepsilon_2$ . Si l'on change  $\mathbf{q}$  en  $-\mathbf{q}$ , la somme est inchangée d'où les propriétés de symétrie des amplitudes,  $\mathbf{A}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t) = \mathbf{A}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t)$  et  $\mathbf{B}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t) = -\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t)$  ce qui permet une décomposition en ondes planes,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} [\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}],$$

où  $\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}$  avec  $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}$  et  $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*$  deux vecteurs unitaires réels dans les deux directions de polarisation,  $(\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = \frac{1}{2}(\mathbf{A}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) - i\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t))$  et  $\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) = -\alpha_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t)$ ). La jauge de Coulomb entraîne

$$\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} = 0$$

qui caractérise la transversalité des modes plans. L'équation des ondes

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0}$$

entraîne

$$c^2 |\mathbf{q}|^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = 0$$

admettant des solutions sinusoidales

$$\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t}, \quad \omega_{\mathbf{q}} = c|\mathbf{q}|.$$

Les modes des champs électrique et magnétique se déduisent des définitions

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} [\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}],$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} [\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}],$$

avec

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = i\omega_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t}, \quad \mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) = -i\omega_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{i\omega_{\mathbf{q}} t},$$

$$\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = i\mathbf{q} \wedge \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t}, \quad \mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) = -i\mathbf{q} \wedge \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{i\omega_{\mathbf{q}} t}.$$

L'énergie totale

$$U = \int_{L^3} d^3r \left( \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t) \right),$$

se met sous la forme

$$U = L^3 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} u_{\mathbf{q}\varepsilon} = 2\varepsilon_0 L^3 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^*.$$

On a par exemple

$$\begin{aligned} \int_{L^3} d^3r \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) &= \int_{L^3} d^3r \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{q}'} \sum_{\varepsilon} \sum_{\varepsilon'} [\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] \\ &\quad \times [\mathbf{E}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}(t) e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^*(t) e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}}]. \end{aligned}$$



Les états de polarisation sont orthogonaux, donc seuls les termes  $\varepsilon = \varepsilon'$  subsistent. Pour les intégrales spatiales on a

$$\int_{L^3} d^3r e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}} = L^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}').$$

$$\int_{L^3} d^3r \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) = L^3 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \left[ \underbrace{\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \mathbf{E}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t)}_{-\omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-2i\omega_{\mathbf{q}} t}} + \underbrace{\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t)}_{\omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^*} \right. \\ \left. + \underbrace{\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) \mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t)}_{\omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}} + \underbrace{\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}^*(t) \mathbf{E}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t)}_{-\omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{2i\omega_{\mathbf{q}} t}} \right],$$

et une expression analogue en ce qui concerne l'énergie associée au champ magnétique. Les premiers termes de chacune de ces expressions par exemple sont de la forme  $\mathbf{E}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \mathbf{E}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t) = -\omega_{\mathbf{q}}^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-2i\omega_{\mathbf{q}} t}$  et  $\mathbf{B}_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \mathbf{B}_{-\mathbf{q}\varepsilon}(t) = |\mathbf{q}|^2 \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-2i\omega_{\mathbf{q}} t}$ . Une fois multipliés par les coefficients  $\frac{1}{2}\varepsilon_0$  et  $\frac{1}{2\mu_0}$  et additionnés, ces termes se compensent exactement :  $\frac{1}{2}\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-2i\omega_{\mathbf{q}} t} (-\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{q}}^2 + \varepsilon_0 c^2 |\mathbf{q}|^2) = 0$ . Il en est de même du terme en  $e^{2i\omega_{\mathbf{q}} t}$  et finalement l'énergie totale est constante au cours du temps et prend la forme annoncée.

On peut introduire des variables canoniques  $Q_{\mathbf{q}\varepsilon}$  et  $P_{\mathbf{q}\varepsilon}$  définies par

$$\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} = [4\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{q}}^2]^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} Q_{\mathbf{q}\varepsilon} + iP_{\mathbf{q}\varepsilon}], \\ \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* = [4\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{q}}^2]^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} Q_{\mathbf{q}\varepsilon} - iP_{\mathbf{q}\varepsilon}],$$

pour obtenir une somme d'oscillateurs harmoniques de masse unité

$$U = L^3 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} u_{\mathbf{q}\varepsilon} = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{2} [\omega_{\mathbf{q}}^2 Q_{\mathbf{q}\varepsilon}^2 + P_{\mathbf{q}\varepsilon}^2].$$

Chaque mode  $\mathbf{q}\varepsilon$  du champ électromagnétique dans la cavité (ou dans le vide en faisant  $L \rightarrow \infty$ ) correspond à un oscillateur harmonique de masse unité et l'énergie électromagnétique associée prend exactement la forme de l'hamiltonien correspondant aux variables dynamiques  $Q_{\mathbf{q}\varepsilon}$  et  $P_{\mathbf{q}\varepsilon}$ . Chaque mode possède donc deux degrés de liberté, emmagasinant chacun une énergie  $\frac{1}{2}k_B T$  à l'équilibre thermique, d'où

$$\overline{u_{\mathbf{q}\varepsilon}} = \frac{\int_0^\infty u_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{-u_{\mathbf{q}\varepsilon}/k_B T} du_{\mathbf{q}\varepsilon}}{\int_0^\infty e^{-u_{\mathbf{q}\varepsilon}/k_B T} du_{\mathbf{q}\varepsilon}} = k_B T,$$

où  $\overline{u_{\mathbf{q}\varepsilon}}$  représente la moyenne thermique,  $\dots$ , de la densité d'énergie.



## 5

# Dénombrement des modes et loi de Planck

On se place toujours dans une cavité cubique avec conditions aux limites périodiques. La densité volumique  $g(|\mathbf{q}|) d|\mathbf{q}|$  de modes disponibles entre  $|\mathbf{q}|$  et  $|\mathbf{q}| + d|\mathbf{q}|$  (quelles que soient la direction ( $q = |\mathbf{q}|$ ) et la polarisation  $\varepsilon$ ) s'écrit

$$g(q) dq = L^{-3} \underbrace{2}_{\varepsilon} \times \underbrace{4\pi q^2 dq}_{\text{volume total}} \times \underbrace{\frac{1}{(2\pi/L)^3}}_{\substack{\text{volume} \\ \text{d'un mode}}} = \frac{q^2}{\pi^2} dq.$$

En termes de fréquence on a

$$g(\nu) d\nu = g(q) dq = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu.$$

Dans l'approche classique, l'hypothèse de Rayleigh-Jeans consiste simplement à écrire que la densité spectrale d'énergie  $u_\nu$  s'obtient en passant à la limite continue (et à l'équilibre thermique),

$$\begin{aligned} L^3 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} u_{\mathbf{q}\varepsilon} &\longrightarrow L^3 \int_0^\infty g(q) dq \overline{u_{\mathbf{q}\varepsilon}} \\ &= L^3 \int_0^\infty g(\nu) d\nu \overline{u_{\mathbf{q}\varepsilon}} \\ &= L^3 \int_0^\infty u_\nu d\nu \end{aligned}$$

ce qui conduit à

$$u_\nu = g(\nu)\overline{u_{\mathbf{q}\epsilon}} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_B T,$$

ce qui donne bien un comportement parabolique à basse fréquence mais conduit à la catastrophe ultraviolette et à une densité d'énergie totale intégrée sur le spectre de fréquence divergente,  $\int_0^\infty u_\nu d\nu \rightarrow \infty$ .

L'hypothèse de Planck consiste simplement à supposer quantifiés les échanges d'énergie entre la cavité et le rayonnement,  $u_{\mathbf{q}\epsilon} = na$ . La moyenne thermique devient

$$\begin{aligned}\overline{u_{\mathbf{q}\epsilon}} &= \frac{\sum_{n=0}^\infty nae^{-na/k_B T}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-na/k_B T}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta a}} \\ &= \frac{a}{e^{\beta a/k_B T} - 1}.\end{aligned}$$

Il en découle une forme équivalente à l'expression empirique pour la densité d'énergie

$$u_\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{\text{const.} \times \nu^3}{e^{\text{const.} \times \nu/k_B T} - 1}$$

à condition de poser  $a = h\nu$  en introduisant une nouvelle constante  $h$  :

$$u_\nu = g(\nu)\overline{u_{\mathbf{q}\epsilon}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad u_{\mathbf{q}\epsilon} = nh\nu.$$

La densité volumique d'énergie intégrée sur tout le spectre redonne bien la loi de Stefan,

$$\int_0^\infty u_\nu d\nu = \sigma T^4.$$

## 6

# Théories quantiques relativistes

### Equation de Schrödinger

Guidés par la “dualité ondes-particules”, ancienne appellation donnée à une série de concepts dus entre autres à de Broglie <sup>(11)</sup> et résumés dans les relations

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$\mathbf{p} = \frac{hc}{\lambda} \hat{\mathbf{u}}_k = \hbar\mathbf{k},$$

nous cherchons une formulation ondulatoire de la mécanique.

Le cas le plus simple est celui de la particule libre, d'énergie  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ , que l'on peut logiquement représenter par une onde plane  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = A_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$  dans la mesure où une telle onde est totalement délocalisée et donc a priori à même de représenter une particule qui a une égale probabilité de se trouver en tout point de l'espace. A quelle équation obéit l'onde plane ? On pourrait bien entendu écrire l'équation des ondes,  $\vec{\nabla}^2 u_{\mathbf{k}} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u_{\mathbf{k}}}{\partial t^2} = 0$  (soit  $\omega = v|\mathbf{k}|$ ), mais on cherche ici une équation du premier ordre en dérivée temporelle pour satisfaire au déterminisme. Utilisant les correspondances rappelées ci-dessus, on écrit plutôt

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = A_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\mathbf{r} - \frac{E}{\hbar}t)}$$

d'où on extrait  $E$  en faisant

$$Eu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$$

<sup>(11)</sup> L. de Broglie, *La longueur d'onde associée à la matière*, CRAS **177**, 507-510 (1923), reproduit dans J. Leite-Lopes et B. Escoubès, *Sources et Evolutions de la Physique Quantique*, Masson, Paris 1995, p.92.

et  $\mathbf{p}$  de même

$$\mathbf{p}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = -i\hbar\vec{\nabla}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t).$$

L'équation  $E = \mathbf{p}^2/2m$  devient alors

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t).$$

Pour une particule soumise à un potentiel  $V(\mathbf{r})$ , on généralise pour obtenir l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$ ,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.1)$$

Nous ne discuterons pas davantage ici les conséquences de cette équation qui constitue l'approche non relativiste traditionnelle de la mécanique quantique. Retenons simplement que la physique est décrite par une fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  dont l'équation de Schrödinger régit la dynamique.

#### Equation de Klein-Gordon

Une généralisation immédiate de l'équation de Schrödinger a été proposée très rapidement (en 1926), indépendamment par Gordon, Fock, Klein, Kudar, de Donder et Van Dungen <sup>(12)</sup>. Il suffit d'effectuer les correspondances

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbf{p} &\rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} \end{aligned}$$

dans l'expression relativiste donnant l'énergie cinétique (au terme  $mc^2$  près),

$$E^2 - |\mathbf{p}|^2c^2 = m^2c^4$$

pour obtenir l'équation de Klein-Gordon de la particule libre,

$$\vec{\nabla}^2\psi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.2)$$

On retrouve l'équation des ondes habituelle, mais avec un terme de masse. Là encore, nous ne nous étendrons pas sur les conséquences cette équation (qui décrit les bosons massifs relativistes de spin zéro), mais indiquons seulement qu'il n'est pas possible de définir une densité de probabilité positive conservée au cours du temps, ce qui invalide en grande partie la théorie basée sur l'équation de Klein-Gordon.

#### Equation de Pauli

L'étude de systèmes sous champ magnétique a mis en évidence de nouvelles particularités de la mécanique quantique. Outre la correspondance classique (qu'on appelle couplage minimal) qui fait passer de  $H$  à  $H + q\phi(\mathbf{r}, t)$  et de  $\mathbf{p}$  à  $\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$

<sup>(12)</sup> Voir S. Schweber, *Relativistic quantum field theory*, Harper and Row, New-York 1961.

sous un champ électromagnétique  $(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}, t))$  Pauli a proposé d'introduire un degré de liberté interne supplémentaire, appelé le spin, ayant dans le cas de l'électron des propriétés analogues à celles d'un moment cinétique  $\frac{1}{2}$ . La fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est remplacée par un spineur, objet à deux composantes (spineur de Pauli)

$$\chi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

pour décrire les degrés de liberté de spin en plus des degrés de liberté d'espace. On obtient alors l'équation de Pauli,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi = \left( \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r}, t) \right) \chi - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \chi,$$

ou sous forme développée,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \left( \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + V(\mathbf{r}) + q\phi(\mathbf{r}, t) \right) \mathbb{1} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

où  $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z$ , avec les matrices de Pauli

$$[\sigma_x] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad [\sigma_y] = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad [\sigma_z] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

La quantité  $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar \boldsymbol{\sigma}$  est appelée spin. Dans le cas de l'électron, on a  $q = -|q_e|$  dans l'équation de Pauli. Les matrices de Pauli forment avec l'identité une base pour la représentation des matrices  $2 \times 2$ , car

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(a+d)\mathbb{1} + \frac{1}{2}(a-d)\sigma_z + \frac{1}{2}(b+c)\sigma_x + \frac{1}{2}i(b-c)\sigma_y.$$

Bien entendu, cette équation n'est pas relativiste, mais elle fait apparaître la nécessité, pour inclure le spin dans la théorie, de chercher une équation relativiste agissant sur des objets à plusieurs composantes.

### Equations de Weyl

Recherche des équations pour des particules sans masse de spin  $\frac{1}{2}$  : on cherche maintenant une équation relativiste pour décrire des fermions sans masse de spin  $\frac{1}{2}$ . On doit s'attendre à retrouver l'équation des ondes sous la forme

$$\vec{\nabla}^2 \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = 0,$$

c'est-à-dire agissant sur des objets ayant a priori deux composantes, des spineurs.

On notera en général  $\chi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$  un spineur à deux composantes. Il faut donc une

## 36

Mis à jour le 11 Septembre 2007

équation matricielle (matrices  $2 \times 2$ ) comportant des dérivées du premier ordre, soit pour être compatible avec  $\partial_\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla})$ ,

$$\mathcal{D}_\pm \chi = \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{1}_{2 \times 2} \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

On a utilisé le fait mentionné plus haut que les matrices de Pauli, avec l'identité, permettent d'exprimer n'importe quelle matrice  $2 \times 2$ . Pour retrouver l'équation des ondes, formons

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_+ \mathcal{D}_- \chi &= \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \underbrace{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla})}_{\vec{\nabla}^2 \mathbb{1}_{2 \times 2}} \right) \chi \\ &= \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \mathbb{1}_{2 \times 2} \chi = 0, \end{aligned}$$

ce qui est bien l'équation cherchée. On dispose donc de deux équations également valables,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_+ \chi^{(+)} &= \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \chi^{(+)} = 0, \\ \mathcal{D}_- \chi^{(-)} &= \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \chi^{(-)} = 0. \end{aligned} \tag{6.4}$$

Ce sont les équations de Weyl. Elles agissent sur des champs de spineurs  $\chi^{(+)}$  et  $\chi^{(-)}$  distincts que l'on interprétera un peu plus loin.

Equation covariante : on peut alors introduire un objet à quatre composantes (spineur de Dirac)

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

(un spineur à quatre composantes dont deux sont en fait associées aux particules et deux aux antiparticules comme on va le voir) et des matrices  $4 \times 4$  (appelées les matrices de Dirac, ici dans la représentation chirale)

$$\begin{aligned} \gamma^\mu &= (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}), \\ \gamma^0 &= \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_{2 \times 2} \\ \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\gamma}^i = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

de sorte que les équations de Weyl se combinent sous une forme unique,

$$\gamma^\mu \partial_\mu \psi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{1}_{2 \times 2} \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} = 0.$$



Les matrices de Dirac obéissent à

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}.$$

Si l'on fait agir sur la solution libre

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu}$$

on obtient

$$i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} \psi = 0. \quad (6.5)$$

L'équation est homogène ; pour avoir une solution non nulle il faut donc annuler le déterminant,

$$\begin{aligned} \text{Det} & \begin{pmatrix} 0 & \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \left| \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \times \left| \frac{E}{c} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \\ &= \begin{vmatrix} \frac{E}{c} - p^3 & -p^1 + ip^2 \\ -p^1 - ip^2 & \frac{E}{c} + p^3 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \frac{E}{c} - p^3 & +p^1 - ip^2 \\ p^1 + ip^2 & \frac{E}{c} + p^3 \end{vmatrix} \\ &= [(E/c)^2 - (p^3)^2 - ((p^1)^2 + (p^2)^2)]^2 \\ &= \left( \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 \right)^2 = 0, \end{aligned}$$

soit finalement

$$E = \pm |\mathbf{p}|c.$$

L'équation de Weyl pour la particule libre admet quatre solutions indépendantes, dont deux avec une énergie positive  $E = |\mathbf{p}|c$  (ce sont les deux composantes de spin de la particule non massive que nous souhaitons modéliser) et deux (associées aux deux composantes de spin de l'antiparticule) avec une énergie négative  $E = -|\mathbf{p}|c$ .

Il est instructif de pousser plus avant la forme covariante de l'équation de Weyl,  $i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0$ , pour chercher à définir le carré invariant. Sur l'équation de Weyl, manifestement covariante,

$$i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} = 0,$$

faisons agir l'opérateur  $i\hbar\gamma^\nu\partial_\nu = i\hbar\gamma^\nu(\partial/\partial x^\nu)$  :

$$\begin{aligned} 0 &= -\hbar^2\gamma^\nu\gamma^\mu\frac{\partial^2}{\partial x^\nu\partial x^\mu}\psi \\ &= -\frac{1}{2}\hbar^2(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu)\partial_\nu\partial_\mu\psi \\ &= -\hbar^2g^{\mu\nu}\partial_\nu\partial_\mu\psi \\ &= (i\hbar\partial^\mu)(i\hbar\partial_\mu)\psi \\ &= p^\mu p_\mu\psi \end{aligned}$$

où l'on a défini

$$p^\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar\partial^\mu. \quad (6.6)$$

On a obtenu ainsi une forme très satisfaisante,

$$p^\mu p_\mu\psi = \left(\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2\right)\mathbb{1}_{4\times 4}\psi = 0. \quad (6.7)$$

Il est important de noter que l'équation de Weyl, sous sa forme manifestement covariante,

$$i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi = 0$$

n'est pas un simple scalaire de Lorentz car  $\gamma^\mu$  est un objet à quatre composantes (comme un 4-vecteur), mais ces composantes sont des matrices  $4 \times 4$  et  $\partial_\mu\psi$  est un objet à 4 composantes scalaires, de sorte que la contraction donne au total un objet à 4 composantes scalaires. C'est le prix qu'il a fallu payer pour quantifier la théorie, puisqu'en physique quantique on travaille sur des objets qui en général ne commutent pas.

### Equation de Dirac

▷ *Equation covariante pour des fermions massifs de spin  $\frac{1}{2}$ .* Pour obtenir l'équation relativiste de l'électron <sup>(13)</sup> et plus généralement pour des fermions massifs de spin  $\frac{1}{2}$ , il suffit de généraliser l'équation de Weyl covariante. Partons de la contraction, ce qui est plus immédiat,

$$[p^\mu p_\mu - m^2 c^2 \mathbb{1}_{4\times 4}]\psi = \left(\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 - m^2 c^2\right)\mathbb{1}_{4\times 4}\psi = 0.$$

<sup>(13)</sup> P.A.M. Dirac, *L'équation d'onde relativiste de l'électron*, Proc. Roy. Soc. **A 117**, 610-624 (1928), traduit dans J. Leite-Lopes et B. Escoubès, op. cit., p.194.

Cela suggère de coupler les équations pour  $\chi^{(+)}$  et  $\chi^{(-)}$  par un terme de masse pour obtenir l'équation covariante de Dirac <sup>(14)</sup>

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} = \gamma^\mu p_\mu \psi = mc\psi, \quad (6.8)$$

(on omet l'opérateur identité), soit, sous forme développée,

$$i\hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix}.$$

Dans le cas d'une particule libre, on a

$$\begin{pmatrix} 0 & E - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ E + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \chi^{(+)} \\ \chi^{(-)} \end{pmatrix}.$$

Il existe d'autres représentations des matrices de Dirac, notamment la représentation de Dirac obtenue par transformation unitaire à partir de la représentation chirale,  $\gamma^\mu \rightarrow U\gamma^\mu U^\dagger$  où  $U = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$ ,

$$\begin{aligned} \gamma^\mu &= (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}), \\ \gamma^0 &= \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Cette fois on obtient dans le cas de la particule libre l'équation

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -E - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

avec  $\psi = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} \chi^{(+)} + \chi^{(-)} \\ \chi^{(+)} - \chi^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ , où  $u$  et  $v$  sont des spineurs à deux composantes. L'équation aux valeurs propres conduit à

$$\text{Det} \begin{pmatrix} E - mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -E - mc^2 \end{pmatrix} = c^2 \mathbf{p}^2 - (E^2 - m^2 c^4) = 0,$$

<sup>(14)</sup> Une notation "slash" a été introduite (par Feynman) pour simplifier légèrement l'écriture. On définit

$$\not{p} \equiv \gamma^\mu a_\mu,$$

ce qui permet d'écrire l'équation de Dirac par exemple comme

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi = (\not{p} - mc)\psi = 0.$$

ou encore pour les particules et les antiparticules,

$$E = \pm \sqrt{|\mathbf{p}|^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (6.9)$$

▷ *Equation de Dirac covariante sous champ.* L'équation de Dirac sous champ s'obtient par couplage minimal,

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - qA_\mu,$$

soit  $i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi = mc\psi$  qu'on écrit encore  $\bar{\gamma}^\mu p_\mu\psi = mc\psi$ , que l'on transforme en

$$\gamma^\mu(p_\mu - qA_\mu)\psi = i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi - q\gamma^\mu A_\mu\psi = mc\psi. \quad (6.10)$$

Pour comparer cette forme à l'équation de Klein-Gordon sous champ par exemple, on multiplie par  $\gamma^\nu(p_\nu - qA_\nu)$  :

$$\gamma^\mu\gamma^\nu(p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu)\psi = m^2c^2\psi,$$

où l'on introduit les matrices

$$\begin{aligned} \sigma^{\mu\nu} &= \frac{1}{2}i(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu), \\ \gamma^\mu\gamma^\nu &= g^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu}. \end{aligned}$$

Il faut faire attention au fait que les grandeurs en général ne commutent pas en mécanique quantique. On peut alors ré-écrire le premier membre de l'équation de Dirac au carré,

$$\begin{aligned} (g^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu})(p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu) &= (p_\mu - qA_\mu)(p^\mu - qA^\mu) \\ &\quad - \frac{1}{2}i(\sigma^{\mu\nu} - \sigma^{\nu\mu})(p_\mu - qA_\mu)(p_\nu - qA_\nu) \\ &= (p_\mu - qA_\mu)(p^\mu - qA^\mu) \\ &\quad - \frac{1}{2}i\sigma^{\mu\nu}[p_\mu - qA_\mu, p_\nu - qA_\nu]. \end{aligned}$$

Le commutateur se développe  $[p_\mu - qA_\mu, p_\nu - qA_\nu] = q[p_\nu, A_\mu] - q[p_\mu, A_\nu] = -i\hbar q(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)$  et on obtient finalement

$$(p_\mu - qA_\mu)(p^\mu - qA^\mu)\psi + \frac{1}{2}q\hbar\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\psi = m^2c^2\psi, \quad (6.11)$$

ce qui fait apparaître très naturellement le tenseur de Faraday, et où le spin est naturellement inclus dans le couplage avec  $F_{\mu\nu}$ .

Formulation alternative : on trouve fréquemment dans la littérature une formulation alternative (ou plutôt des notations alternatives pour les matrices de Dirac). On définit les 4 matrices hermitiennes

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

c'est-à-dire que l'on a  $\beta = \gamma^0$  et  $\beta\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\gamma}$ ,  $\beta^\dagger = \beta$ ,  $\boldsymbol{\alpha}^\dagger = \boldsymbol{\alpha}$ . On a ensuite directement

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= H\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc^2) \psi \\ &= (c\boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + \beta mc^2) \psi \end{aligned} \quad (6.12)$$

ou encore, par action sur une onde plane,

$$(E - c\boldsymbol{\alpha} \mathbf{p}) \psi = \beta mc^2 \psi.$$

### Synthèse

On peut résumer les diverses équations obtenues qui sont compatibles avec la théorie de la relativité <sup>(15)</sup>. Le prototype en est finalement fourni par l'équation de Klein-Gordon,  $(\square + m^2 c^2 / \hbar^2) \phi = 0$ , équation du second ordre pour un champ scalaire massif, susceptible de décrire des bosons massifs de spin nul. Les autres équations, agissant sur des objets plus complexes, comme des spineurs, doivent redonner l'équation de Klein-Gordon pour chacune des composantes.

Pour le champ de Maxwell dans le vide, décrivant des bosons non massifs de spin 1 (les photons), on a d'une part les équations de Maxwell

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0,$$

et d'autre part la définition de  $F^{\mu\nu}$  en fonction de  $A^\mu$  qui conduit à l'équation de propagation,

$$\square A^\mu = 0$$

compatible avec l'équation de Klein-Gordon pour des particules sans masse. On peut généraliser au cas de bosons massifs de spin 1, avec l'équation de Proca,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} A^\nu = 0,$$

équivalente à l'équation de propagation,

$$\left( \square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) A^\mu = 0.$$

Dans le cas des fermions de spin  $\frac{1}{2}$ , on a tout d'abord le cas de particules non massives, décrit par l'équation de Weyl,

$$i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \chi = 0$$

$$\square \chi = 0.$$

Finalement, le cas massif est donné par l'équation de Dirac,

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi = 0$$

$$\left( \square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0.$$

<sup>(15)</sup> L.H. Ryder, *Quantum field theory*, Cambridge University Press, Cambridge 1985.



**7****Dynamique quantique et représentations****Représentation de Schrödinger**

La représentation usuelle de la mécanique quantique est appelée représentation de Schrödinger. À toute observable classique  $\mathcal{A}$  elle associe un opérateur hermitien  $A$  de sorte que pour un système physique dans l'état  $|\psi_S(t)\rangle$ , la moyenne de l'observable au cours du temps soit donnée par un élément de matrice,

$$\langle \psi_S(t) | A | \psi_S(t) \rangle.$$

Ici on note  $\psi_S$  par référence à l'appellation *représentation de Schrödinger* bien qu'en général cette précision soit omise.

L'évolution temporelle est donc portée par le vecteur d'état dont la dynamique est régie par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \partial_t |\psi_S(t)\rangle = H |\psi_S(t)\rangle.$$

On peut encore décrire la dynamique par un opérateur d'évolution,

$$\begin{aligned} |\psi_S(t)\rangle &= U(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle \\ \|\psi_S(t)\|^2 &= \langle \psi_S(t) | \psi_S(t) \rangle \\ &= \langle \psi_S(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \psi_S(t_0) \rangle \\ &= \|\psi_S(t_0)\|^2 \end{aligned}$$

soit  $U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = 1$ . L'opérateur d'évolution est unitaire de manière à conserver la norme du vecteur d'état au cours de son évolution. Par intégration formelle de l'équation de Schrödinger, on a

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right),$$

où, comme  $H$  est un opérateur, l'exponentielle est définie par son développement

$$\exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)\right) = 1 + \frac{-i}{\hbar}H(t-t_0) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \frac{[H(t-t_0)]^2}{2!} + \dots$$

Une expression plus explicite de  $U(t, t_0)$  peut être obtenue en introduisant la base des états propres de  $H$ ,

$$U(t, t_0) = \sum_E |E\rangle \exp(-iE(t-t_0)/\hbar) \langle E|,$$

$$|\psi_S(t_0)\rangle = \sum_E |E\rangle \langle E|\psi_S(t_0)\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi_S(t)\rangle &= U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle \\ &= \sum_E |E\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)} \langle E|\psi_S(t_0)\rangle. \end{aligned}$$

Ceci suppose que l'hamiltonien est indépendant du temps. Lorsque ce n'est pas le cas, des complications apparaissent dans l'intégration formelle de l'équation d'évolution,

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right).$$

De nouveau on développe l'exponentielle en série pour donner un sens à cette expression,

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' + \frac{1}{2!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H(t') H(t'') dt' dt'' + \dots$$

Nous avons supposé de plus dans cette expression que l'hamiltonien dépendant du temps commute aux différents temps,  $[H(t'), H(t'')] = 0$ . Si les valeurs propres dépendant du temps sont connues, alors

$$U(t, t_0) = \sum_E |E\rangle \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t E(t') dt'\right) \langle E|.$$

Supposons maintenant que l'hamiltonien à différents temps ne commute pas. Nous allons établir l'équation d'évolution de l'opérateur d'évolution. Sur  $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ , faisons agir  $H(t)$  d'une part,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  d'autre part. Il vient

$$[H(t)U(t, t_0)]|\psi(t_0)\rangle = \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) \right] |\psi(t_0)\rangle,$$

équation valable pour tout  $|\psi(t_0)\rangle$  si

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0).$$



C'est l'équation cherchée que l'on intègre formellement en

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0).$$

L'opérateur d'évolution apparaît comme fonction de lui-même. On peut résoudre cette équation par itérations successives,

$$\begin{aligned} \text{1ère étape : } U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t'') U(t'', t_0) \right] \\ &= 1 + \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t dt' H(t') + \\ &\quad + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') U(t'', t_0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{2ème étape : } U(t, t_0) &= 1 + \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t dt' H(t') + \\ &\quad + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') + \\ &\quad + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt''' H(t') H(t'') H(t''') U(t''', t_0). \end{aligned}$$

Il faut faire attention à l'ordre des bornes d'intégration,  $t_0 \leq t''' \leq t'' \leq t' \leq t$ . La solution obtenue de manière itérative prend ainsi la forme

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_n) H(t_{n-1}) \dots H(t_1),$$

quantité que l'on note généralement

$$U(t, t_0) = T_{\leftarrow} \exp \left( \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right)$$

en introduisant l'opérateur de mise en ordre chronologique  $T_{\leftarrow}$ . C'est une notation symbolique. Si on la compare au développement ordinaire de l'exponentielle que nous aurions dans le cas où il n'y a aucune difficulté de commutation,

$$1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_n) H(t_{n-1}) \dots H(t_1),$$

on voit que les bornes des intégrales diffèrent et que le dénominateur en factorielle  $n$  a disparu (il y a  $n!$  façons différentes d'ordonner les  $t_1, t_2, \dots, t_n$ ). On notera également que les opérateurs agissent à droite.

Par la suite on supposera que le cas le plus simple s'applique, c'est-à-dire que l'hamiltonien est indépendant du temps et que l'opérateur d'évolution prend sa forme exponentielle la plus simple. Lorsqu'une dépendance temporelle interviendra explicitement, elle sera limitée à un terme d'interaction et traitée de manière perturbative.

### Représentation d'Heisenberg

On s'intéresse toujours à la moyenne d'une observable au cours du temps, mais on l'écrit différemment.

$$\begin{aligned} \langle \psi_S(t) | A | \psi_S(t) \rangle &= \langle \psi_S(t_0) | \underbrace{U^{-1}(t, t_0) A U(t, t_0)}_{A_H(t)} | \underbrace{\psi_S(t_0)}_{|\psi_H\rangle} \rangle \\ &= \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle. \end{aligned}$$

On a donc des vecteurs d'état indépendants du temps en *représentation de Heisenberg*,

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle &= |\psi_S(t_0)\rangle \\ &= U^{-1}(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |\psi_S(t)\rangle, \end{aligned}$$

mais les opérateurs en revanche en dépendent explicitement,

$$\begin{aligned} A_H(t) &= U^{-1}(t, t_0) A U(t, t_0) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}. \end{aligned}$$

La dynamique doit donc porter sur les opérateurs en représentation d'Heisenberg :

$$\begin{aligned} \partial_t A_H(t) &= \frac{i}{\hbar} H e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \\ &\quad - e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \frac{i}{\hbar} H \\ &= -\frac{i}{\hbar} [A_H(t), H] \\ i\hbar \partial_t A_H(t) &= [A_H(t), H]. \end{aligned}$$

Dans ce sens, un opérateur qui commute avec l'hamiltonien est une constante du mouvement, ce qui rend le lien avec la physique classique probablement plus immédiat qu'au travers de la représentation usuelle de Schrödinger. Par ailleurs, on a bien évidemment  $H_H(t) = H$

### Représentation d'interaction

La *représentation d'interaction* est très utile pour traiter les perturbations dépendant du temps, l'intérêt essentiel étant d'éliminer la dépendance temporelle rapide du vecteur d'état due à des termes constants dans l'hamiltonien.

On considère donc en représentation de Schrödinger l'hamiltonien

$$H(t) = H_0 + W(t)$$

où  $H_0$  ne dépend pas explicitement de  $t$ . On effectue donc une représentation partielle d'Heisenberg,

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= U_0(t, t_0) U_1(t, t_0) \\ &= e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} e^{-i \int_{t_0}^t W(t) dt/\hbar} \end{aligned}$$

ce qui permet d'exprimer l'élément de matrice de  $A$  comme

$$\begin{aligned} \langle \psi_S(t) | A | \psi_S(t) \rangle &= \underbrace{\langle \psi_S(t_0) | U_1^{-1}(t, t_0) }_{\langle \psi_I(t) |} \underbrace{U_0^{-1}(t, t_0) A U_0(t, t_0)}_{A_I(t)} \underbrace{U_1(t, t_0) | \psi_S(t_0) \rangle}_{| \psi_I(t) \rangle} \\ &= \langle \psi_I(t) | A_I(t) | \psi_I(t) \rangle. \end{aligned}$$

Opérateurs et vecteurs d'état dépendent cette fois tous deux du temps, mais de manières différentes,

$$\begin{aligned} | \psi_I(t) \rangle &= U_1(t, t_0) | \psi_S(t_0) \rangle \\ &= U_0^{-1}(t, t_0) | \psi_S(t) \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} | \psi_S(t) \rangle \\ A_I(t) &= U_0^{-1}(t, t_0) A U_0(t, t_0) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \end{aligned}$$

Lorsque l'on écrit l'équation dynamique pour  $| \psi_I(t) \rangle$ , on constate qu'il évolue sous l'influence de  $W_I(t)$  uniquement, plus lentement que  $| \psi_S(t) \rangle$  :

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t | \psi_I(t) \rangle &= i\hbar \left( \partial_t e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \right) | \psi_S(t) \rangle \\ &\quad + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \partial_t | \psi_S(t) \rangle \\ &= i\hbar \frac{i}{\hbar} H_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} | \psi_S(t) \rangle \\ &\quad + e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} (H_0 + W(t)) | \psi_S(t) \rangle \\ &= U_0^{-1}(t, t_0) W(t) \underbrace{U_0(t, t_0) U_0^{-1}(t, t_0)}_{\mathbf{1}} | \psi_S(t) \rangle \\ &= W_I(t) | \psi_I(t) \rangle \end{aligned}$$

soit finalement une équation de Schrödinger ordinaire pour le vecteur d'état en représentation d'interaction sous l'effet de la partie dépendant explicitement du temps dans l'hamiltonien, partie elle-même exprimée en représentation d'interaction,

$$i\hbar \partial_t | \psi_I(t) \rangle = W_I(t) | \psi_I(t) \rangle.$$



## 8

# Transitions quantiques sous l'influence d'une perturbation externe

### Série perturbative

La représentation d'interaction permet une formulation allégée de la théorie des perturbations dépendant du temps. Soit  $H_0$  un hamiltonien dont on connaît les valeurs propres et les états propres,

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle,$$

auquel on ajoute une perturbation dépendant explicitement du temps,  $W(t)$ , et supposée assez faible pour qu'un traitement perturbatif soit licite (on donnera ultérieurement un sens plus précis à cette condition),  $H(t) = H_0 + W(t)$ .

Par hypothèse, à un instant initial choisi comme origine des temps, le système est dans un état propre de  $H_0$ . Aux temps ultérieurs, on décompose l'état  $\psi(t)$  sur la base des  $\varphi_n$  :

$$\begin{aligned} \text{à } t = 0, \quad & |\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle \\ \text{à } t > 0, \quad & |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle \\ & c_n(t) = \langle\varphi_n|\psi(t)\rangle \\ & c_n(0) = \delta_{n,i} \end{aligned}$$

On cherche la probabilité de transition  $P_{fi}(t)$  à l'instant  $t$  vers un état final donné,  $|\varphi_f\rangle$ , parmi les états propres de  $H_0$  <sup>(16)</sup>,

<sup>(16)</sup> Si on voulait étudier une transition vers un état  $|\phi\rangle$  quelconque, on pourrait en principe l'obtenir par décomposition à nouveau sur les transitions vers les  $|\varphi_n\rangle$ .

# 50

Mis à jour le 11 Septembre 2007

$$P_{f_i}(t) = |A_{f_i}(t)|^2 = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2.$$

Il suffit de calculer  $c_f(t)$ . Partant de l'équation d'évolution

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle,$$

on développe pour obtenir

$$i\hbar \sum_n \partial_t c_n(t) |\varphi_n\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |\varphi_n\rangle + \sum_n c_n(t) W(t) |\varphi_n\rangle.$$

En représentation d'interaction la formulation est simplifiée. On a tout d'abord

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} |\psi_S(t)\rangle \\ W_I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} W(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ i\hbar \partial_t |\psi_I(t)\rangle &= W_I(t) |\psi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

et par intégration formelle de l'équation de Schrödinger, on obtient

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(0)\rangle + (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 W_I(t_1) |\psi_I(t_1)\rangle.$$

C'est une équation implicite pour  $|\psi_I(t)\rangle$  qui s'écrit encore de manière perturbative par itérations successives,

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= |\psi_I(0)\rangle \\ &+ (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 W_I(t_1) |\psi_I(0)\rangle \\ &+ (i\hbar)^{-2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 W_I(t_1) W_I(t_2) |\psi_I(0)\rangle \\ &+ (i\hbar)^{-3} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 W_I(t_1) W_I(t_2) W_I(t_3) |\psi_I(0)\rangle \\ &\dots \end{aligned}$$

ce que l'on peut représenter symboliquement par le diagramme

$$\begin{aligned}
 |\psi_I(t)\rangle &= |\psi_I(0)\rangle \\
 &+ \begin{array}{c} t \quad t_1 \quad 0 \\ \circ \end{array} \\
 &+ \begin{array}{c} t_1 \quad t_2 \quad 0 \\ \circ \quad \circ \end{array} \\
 &+ \begin{array}{c} \circ \quad \circ \quad \circ \end{array} \\
 &+ \dots
 \end{aligned}$$

L'amplitude de transition cherchée est donnée par<sup>(17)</sup>

$$\begin{aligned}
 A_{fi}(t) &= c_f(t) \\
 &= \langle \varphi_f | \psi(t) \rangle \\
 &= \langle \varphi_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} | \psi_I(t) \rangle \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t} \underbrace{\langle \varphi_f | \psi_I(t) \rangle}_{\gamma_f(t)}
 \end{aligned}$$

Pour le calcul de la probabilité de transition,  $\gamma_f(t)$  suffit, puisque  $\gamma_f(t)$  et  $c_f(t)$  ne diffèrent que d'un facteur de phase,  $|\gamma_f(t)| = |c_f(t)|$ .

### Calcul au premier ordre

Au premier ordre en perturbation, on se limite à la première correction à  $|\psi_I(0)\rangle$ ,

$$\begin{aligned}
 \gamma_f(t) &= \langle \varphi_f | \psi_I(t) \rangle \\
 &= \langle \varphi_f | \psi_I(0) \rangle \\
 &+ (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 \langle \varphi_f | W_I(t_1) | \psi_I(0) \rangle
 \end{aligned}$$

<sup>(17)</sup> On rappelle la notation, moins ambiguë que la notation de Dirac lorsque l'on fait agir des opérateurs non hermitiens, utilisée en mathématiques. Voici un exemple pour faire agir sur le bra :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_b | e^{-iH_0 t/\hbar} | \varphi_a \rangle &= (\varphi_b, e^{-iH_0 t/\hbar} \varphi_a) \\
 &= (\varphi_b [e^{-iH_0 t/\hbar}]^\dagger, \varphi_a) \\
 &= (\varphi_b e^{+iE_b t/\hbar}, \varphi_a) \\
 &= [e^{+iE_b t/\hbar}]^* (\varphi_b, \varphi_a) \\
 &= e^{-iE_b t/\hbar} (\varphi_b, \varphi_a)
 \end{aligned}$$

Le premier terme donne  $|\psi_I(0)\rangle = |\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$ . L'élément de matrice vaut

$$\begin{aligned}\langle\varphi_f|W_I(t_1)|\psi_I(0)\rangle &= \langle\varphi_f|e^{\frac{i}{\hbar}H_0t_1}W_I(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_1}|\psi_I(0)\rangle \\ &= e^{i\omega_{fi}t_1}W_{fi}(t_1)\end{aligned}$$

où  $\omega_{fi}$  est la pulsation de Bohr associée à la transition  $i \rightarrow f$  et  $W_{fi}(t)$  l'élément de matrice de la perturbation en représentation ordinaire de Schrödinger,

$$W_{fi}(t_1) = \langle\varphi_f|W(t_1)|\varphi_i\rangle.$$

On obtient alors pour l'amplitude de transition

$$\begin{aligned}A_{fi}^{(1)}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}\gamma_{fi}(t) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}\left(\delta_{fi} + (i\hbar)^{-1}\int_0^t dt_1 e^{i\omega_{fi}t_1}W_{fi}(t_1)\right)\end{aligned}$$

et comme on s'intéresse généralement à une transition vers un état distinct de l'état initial, la probabilité de transition est donnée au premier ordre par

$$P_{fi}^{(1)}(t) = \left|(i\hbar)^{-1}\int_0^t dt_1 e^{i\omega_{fi}t_1}W_{fi}(t_1)\right|^2.$$

### Calcul au second ordre

Si l'élément de matrice  $W_{fi}(t)$  est nul (ce qui se produit lorsque certaines règles de sélection ne sont pas satisfaites par l'état final), il faut alors examiner la correction au second ordre. En supposant  $\delta_{fi} = 0$ , il vient

$$\begin{aligned}\gamma_{fi}^{(2)} &= (i\hbar)^{-2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle\varphi_f|W_I(t_1)W_I(t_2)|\varphi_i\rangle \\ &= (i\hbar)^{-2}\sum_n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle\varphi_f|W_I(t_1)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|W_I(t_2)|\varphi_i\rangle \\ &= (i\hbar)^{-2}\sum_n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_{fn}t_1}W_{fn}(t_1)e^{i\omega_{ni}t_2}W_{ni}(t_2)\end{aligned}$$

soit encore

$$P_{fi}^{(2)}(t) = \left|(i\hbar)^{-2}\sum_n \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{fn}t_1}W_{fn}(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_{ni}t_2}W_{ni}(t_2)\right|^2.$$



## 9

# Perturbations oscillante et adiabatique

### Perturbation oscillante

Un cas très important en pratique est celui d'une perturbation sinusoïdale,

$$\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(\mathbf{r}) \cos \omega t = \frac{1}{2} \hat{U}(\mathbf{r}) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}).$$

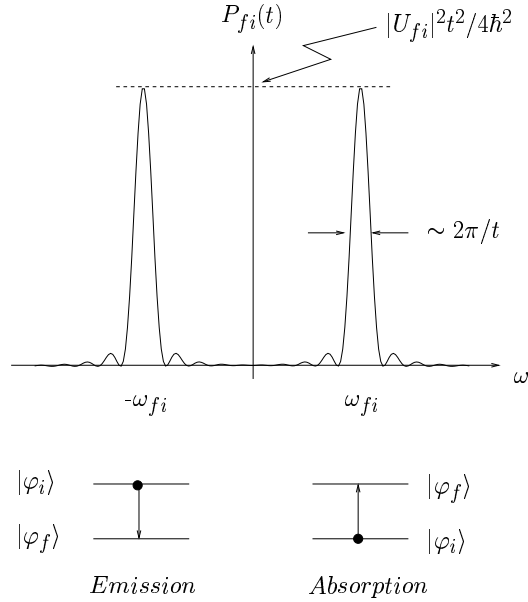
On pose  $U_{fi} = \langle \varphi_f | \hat{U}(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle$  pour l'intégrale spatiale supposée non nulle (on se contente donc du calcul au premier ordre).

$$\begin{aligned} \gamma_{fi}(t) &= \frac{1}{2} U_{fi} (i\hbar)^{-1} \int_0^t (e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'} + e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}) dt' \\ |A_{fi}(t)| &= \left| \frac{U_{fi}}{2i\hbar} \left[ \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{i(\omega_{fi} + \omega)} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{i(\omega_{fi} - \omega)} \right] \right| \end{aligned}$$

Le premier terme est dominant lorsque  $\omega \rightarrow -\omega_{fi}$  et le second lorsque  $\omega \rightarrow \omega_{fi}$ . On peut en général considérer que l'un des deux termes contribue de façon significative de sorte que l'on peut négliger le terme croisé (c'est une simplification qui n'est pas du tout indispensable techniquement, mais elle allège considérablement les notations).

En utilisant  $|1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}|^2 = 4 \sin^2 \left( \frac{\omega_{fi}+\omega}{2} t \right)$ , on a

$$P_{fi}(t) = \frac{|U_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left[ \frac{\sin^2 \left( \frac{\omega_{fi}+\omega}{2} t \right)}{\left( \frac{\omega_{fi}+\omega}{2} \right)^2} + \frac{\sin^2 \left( \frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t \right)}{\left( \frac{\omega_{fi}-\omega}{2} \right)^2} \right].$$



Physiquement on impose  $\omega > 0$ . Les deux résonances s'interprètent par deux processus distincts, mais pour lesquels les probabilités associées sont identiques.

- i) Si  $\omega_{fi} > 0$ , c'est-à-dire si l'état initial a une énergie inférieure à celle de l'état final,  $E_f > E_i$ , on parle d'absorption (le gain d'énergie pour le système est prélevé à la perturbation, le système absorbe  $\hbar\omega_{fi}$ ). Ce n'est possible que pour une perturbation accordée à la fréquence de Bohr de la transition,  $\omega \simeq \omega_{fi}$ .
- ii) Si au contraire  $\omega_{fi} < 0$  c'est que l'état final a une énergie moindre, dans ce cas on parle d'émission et le système perd de l'énergie au bénéfice de l'extérieur.

L'approximation du premier ordre est contrainte à des conditions de validité. Avoir négligé le terme croisé dans le calcul de  $P_{fi}(t)$  est légitime si  $2|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega$ .  $\Delta\omega$  peut être évalué en notant que le sinus s'annule en  $\pm\Delta\omega$  par rapport au centre du pic, soit

$$\sin\left(\frac{\omega_{fi} - \omega_{1,2}}{2}t\right) = 0$$

$$2\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 = \frac{4\pi}{t}$$

$$|\omega_{fi}| \gg \frac{\pi}{t}$$

soit pour  $t \gg |\omega_{fi}|^{-1} \simeq \omega^{-1}$ . La durée de l'interaction doit être grande devant la période de l'onde perturbative pour que le système ait le temps de percevoir la nature périodique de la perturbation.

Par ailleurs,  $P_{fi}$  étant une probabilité, elle est bornée à 1 ce qui impose  $|U_{fi}|^2 t^2 / 4\hbar^2 < 1$ , soit  $t < \hbar / |U_{fi}|$ .

Un point particulièrement important est celui du comportement asymptotique aux temps longs (au sens où les contraintes précédentes sont supposées satisfaites). On peut retrouver le comportement de la fonction  $\sin^2 \alpha t / \alpha^2$  pour  $t \gg \alpha^{-1}$  en notant que l'intégrale

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2} d\alpha = \underbrace{\frac{\pi}{t}}_{\text{largeur}} \times \underbrace{t^2}_{\text{hauteur}} = \pi t$$

ce qui permet d'identifier

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\alpha^2} = \pi t \delta(\alpha).$$

On rappelle aussi la propriété de translation de  $\delta$ ,  $\delta(a\alpha) = |a|^{-1} \delta(\alpha)$ . On a ainsi

$$\begin{aligned} \lim_{t \gg \omega^{-1}} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right)^2} &= 2\pi t \delta(\omega - \omega_{fi}) \\ &= 2\pi \hbar t \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \end{aligned}$$

soit

$$P_{fi}(t) \simeq \frac{1}{2} \frac{|U_{fi}|^2 \pi}{\hbar} t [\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)]$$

qui assure la conservation de l'énergie totale du système au cours de la transition. On distingue en général deux processus, soit pour l'émission, soit pour l'absorption, comme indiqué ci-dessous,

**Tableau 9.1** Comportement asymptotique de la probabilité de transition sous l'effet de perturbations oscillantes.

| Perturbation  | Probabilité de transition   |
|---|---|
| $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(\mathbf{r}) \cos \omega t$    | $P_{fi}(t) \simeq \frac{1}{2} \frac{ U_{fi} ^2 \pi}{\hbar} t [\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)]$ |
| $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^+(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ | $P_{fi}^{abs}(t) \simeq \frac{2\pi t}{\hbar}  U_{fi}^+ ^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$  |
| $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^-(\mathbf{r}) e^{i\omega t}$  | $P_{fi}^{ém}(t) \simeq \frac{2\pi t}{\hbar}  U_{fi}^- ^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$   |

On définit également les taux de transition, qui sont simplement les probabilités par unité de temps, soit pour une perturbation sinusoïdale

$$\Gamma_{fi} = \frac{1}{2} \frac{|U_{fi}|^2 \pi}{\hbar} [\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)]$$

et pour l'absorption et l'émission

$$\begin{aligned} \Gamma_{fi}^{abs} &= \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}^+|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \\ \Gamma_{fi}^{ém} &= \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}^-|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega). \end{aligned}$$

**Perturbation constante**

Dans le cas d'une perturbation constante (réelle)  $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = W$  s'établissant pendant la durée 0 à  $\tau$ , l'amplitude de transition au premier ordre est de la forme

$$\begin{aligned}\gamma_{fi}(t) &= W (i\hbar)^{-1} \int_0^\tau e^{i\omega_{fi}t'} dt' \\ |A_{fi}(t)| &= \frac{W}{\hbar\omega_{fi}} |1 - e^{i\omega_{fi}\tau}| \\ &= \frac{2W}{\hbar\omega_{fi}} \sin(\omega_{fi}\tau/2)\end{aligned}$$

En utilisant les propriétés de  $\delta$ , on obtient donc aux temps  $\tau$  assez longs (notamment pour une perturbation "branchée à  $t = 0$ " jusqu'à  $\tau \rightarrow \infty$ , encore appelée perturbation adiabatique) la probabilité de transition et le taux de transition associé

$$\begin{aligned}P_{fi}(\tau) &= \frac{2\pi}{\hbar^2} W^2 \tau \delta(\omega_{fi}), \\ \Gamma_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar} W^2 \delta(E_f - E_i).\end{aligned}$$

Ces résultats sont aussi obtenus simplement par la limite  $\omega \rightarrow 0$  des cas précédents.

## 10

# Règle d'or de Fermi

Un cas particulièrement important est celui où l'état initial ou l'état final (ou les deux) fait partie d'un continuum. Supposons par exemple que ce soit l'état final (c'est la cas le plus fréquent) et notons  $\rho(E)$  la densité d'états, c'est-à-dire

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE}$$

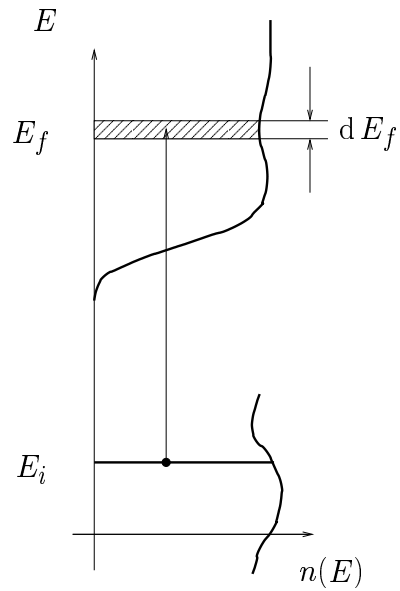
où  $n$  est le nombre d'états, qui peut être ramené selon les cas par unité d'angle solide, par polarisation, etc. On sera amené plus tard à préciser soigneusement la notation. On distinguera le nombre d'états quantiques du système,  $n$ , du nombre  $N$  d'interactions entre faisceau incident et cible lors des expériences de diffusion décrites ultérieurement. On introduit alors le taux de transition (élémentaire) vers l'état final d'énergie  $E_f$  à  $dE_f$  près, par exemple dans le cas du mécanisme d'absorption (c'est-à-dire avec une perturbation de la forme  $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^+(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ ),

$$d\Gamma_{fi}^{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}^+|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \rho(E_f) dE_f,$$

soit, par intégration sur les états finals permis,

$$\Gamma_{fi}^{abs} = \int d\Gamma_{fi}^{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}^+|^2 \rho(E_f), \quad E_f = E_i + \hbar\omega$$

Ce résultat constitue la règle d'or de Fermi. La dernière contrainte résulte de l'intégration sur  $\delta$ , elle assure la conservation de l'énergie.



**Tableau 10.1** Transitions vers un état du continuum

| Mécanisme   | Perturbation  | Taux de transition  | condition                 |
|-------------|---|---|---------------------------|
| Absorption  | $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^+(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ | $\Gamma_{fi}^{abs}(t) \simeq \frac{2\pi t}{\hbar}  U_{fi}^+ ^2 \rho(E_f)$ | $E_f = E_i + \hbar\omega$ |
| Emission    | $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^-(\mathbf{r}) e^{i\omega t}$  | $\Gamma_{fi}^{ém}(t) \simeq \frac{2\pi t}{\hbar}  U_{fi}^- ^2 \rho(E_f)$  | $E_f = E_i - \hbar\omega$ |
| Adiabatique | $\hat{W}(\mathbf{r}, t) = W \times H(t)$                        | $\Gamma_{fi}^{abs}(t) \simeq \frac{2\pi t}{\hbar} W^2 \rho(E_f)$          | $E_f = E_i$               |
|             | $H(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \geq 0 \end{cases}$    |   |                           |

## **Quantification canonique**

**60**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*



# 11

## Théorèmes d'Ehrenfest, quantification canonique

### Théorèmes d'Ehrenfest

La représentation de Heisenberg permet une connexion aisée avec la dynamique classique au moyen des théorèmes d'Ehrenfest. On considère l'hamiltonien classique

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

auquel on fait correspondre <sup>(18)</sup> l'opérateur  $\hat{H}$ , de même que les opérateurs  $\hat{q}$  et  $\hat{p}$  satisfaisant à  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ .

En représentation de Heisenberg la dynamique est régie par les équations

$$\partial_t \hat{p}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_H(t), \hat{H}]$$

$$\partial_t \hat{q}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}_H(t), \hat{H}]$$

Les opérateurs  $\hat{q}_H(t)$  et  $\hat{p}_H(t)$  satisfont aux relations de commutation

$$[\hat{q}_H(t), \hat{q}_H(t)] = 0$$

$$[\hat{p}_H(t), \hat{p}_H(t)] = 0$$

$$\begin{aligned} [\hat{q}_H(t), \hat{p}_H(t)] &= e^{iH(t-t_0)/\hbar} [\hat{q}, \hat{p}] e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \\ &= i\hbar \end{aligned}$$

---

<sup>(18)</sup> On distingue les opérateurs par des chapeaux dans ce chapitre.

Pour calculer  $[\hat{p}_H(t), \hat{H}] = [\hat{p}_H(t), \hat{V}]$  où  $\hat{V} \equiv \hat{V}(\hat{q}_H(t))$ , on effectue un développement de Taylor du potentiel et on évalue le commutateur de chaque terme avec  $\hat{p}_H(t)$ ,

$$\hat{V}(\hat{q}_H(t)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\partial_{q_H(t)}^n V]_0 \hat{q}_H^n(t).$$

On peut noter ici (en représentation de position) que  $[\partial_{q_H(t)}^n V]_0$  est la dérivée énième de la *fonction*  $V(q)$  par rapport à la *variable réelle*  $q$ , effectuée en  $q = 0$ . Le calcul se ramène donc à celui de  $[\hat{q}^n, \hat{p}]$ . Un calcul (par récurrence par exemple) montre que

$$\begin{aligned} [\hat{q}^n, \hat{p}] &= ni\hbar \hat{q}^{n-1} \\ [\hat{p}^n, \hat{q}] &= -ni\hbar \hat{p}^{n-1} \end{aligned}$$

et de même en représentation de Heisenberg. On en déduit

$$\begin{aligned} [\hat{p}_H(t), \hat{V}] &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\partial_{q_H(t)}^n V]_0 [\hat{q}_H^n(t), \hat{p}_H(t)] \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\partial_{q_H(t)}^n V]_0 ni\hbar \hat{q}_H^{n-1}(t) \\ &= -i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} [\partial_{q_H(t)}^n V]_0 \hat{q}_H^{n-1}(t) \\ &= -i\hbar \frac{\partial \hat{V}_H(t)}{\partial \hat{q}_H(t)} \\ &= -i\hbar \frac{\partial \hat{H}_H(t)}{\partial \hat{q}_H(t)} \end{aligned}$$

La dynamique de  $\hat{p}_H(t)$  est donc gouvernée par

$$\partial_t \hat{p}_H(t) = - \frac{\partial \hat{H}_H(t)}{\partial \hat{q}_H(t)}.$$

Un calcul analogue avec  $\hat{q}_H(t)$  donne

$$\partial_t \hat{q}_H(t) = \frac{\partial \hat{H}_H(t)}{\partial \hat{p}_H(t)}.$$

On notera ici que  $\hat{p}_H(t)$  et  $\hat{q}_H(t)$  sont des opérateurs, encore appelés  $q$ -nombres, contrairement aux nombres ordinaires, aussi appelés  $c$ -nombres. Les  $q$ -nombres sont remplacés par des valeurs numériques en prenant des valeurs moyennes (ce qui constitue les théorèmes d'Ehrenfest).

La similitude avec les équations classiques d'Hamilton est remarquable et les valeurs moyennes quantiques se comportent comme les valeurs classiques de sorte que la physique classique apparaît bien comme limite de la mécanique quantique.

### Quantification canonique

En mécanique classique, les équations dynamiques se déduisent du principe de moindre action <sup>(19)</sup>,

$$\delta S = 0$$

$$S = \int dt L(q, \dot{q})$$

et  $\delta S$  est une dérivée fonctionnelle,

$$\delta S = \int dt \frac{\delta S}{\delta q(t)} \delta q(t)$$

qui donne, après intégration par parties,

$$\delta S = \int dt \left( \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q(t) = 0$$

d'où les équations d'Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0.$$

Le moment  $p$  conjugué de  $q$  est défini par

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

et l'hamiltonien par transformation de Legendre

$$H = p\dot{q} - L,$$

ce qui conduit aux équations d'Hamilton

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}.$$

On passe à une théorie quantique en remplaçant les variables classiques par des opérateurs en représentation de Heisenberg  $q_H(t)$  et  $p_H(t)$  assortis des règles de commutation habituelles, c'est-à-dire tels que <sup>(20)</sup>

$$[q_H(t), p_H(t)] = i\hbar$$

$$\dot{q}_H(t) = (i\hbar)^{-1} [q_H(t), H(t)]$$

$$\dot{p}_H(t) = (i\hbar)^{-1} [p_H(t), H(t)]$$

<sup>(19)</sup> On considère ici un seul degré de liberté.

<sup>(20)</sup> Cette fois on omet les chapeaux pour particulariser les opérateurs.

ce qui permet d'exprimer par exemple l'hamiltonien en représentation d'Heisenberg,  $H(\mathbf{r}, t)$ . L'expression cherchée en représentation de Schrödinger est ensuite donnée par  $H(\mathbf{r}, 0)$ .

### Quantification d'une théorie des champs

Si l'on passe à une théorie des champs continus  $\phi(t, \mathbf{r})$ , on définit la densité lagrangienne  $\mathcal{L}(t, \mathbf{r})$ ,

$$L(t) = \int d^3r \mathcal{L}(t, \mathbf{r})$$

et l'action correspondante

$$S = \int d^4x L(x),$$

$$x \equiv (t, \mathbf{r}), \quad d^4x = dt d^3r$$

$$\frac{\delta S}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial L}{\partial \phi} - \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{\partial \phi}{\partial (\partial \phi / \partial x_{\mu})} = 0.$$

Le champ canoniquement conjugué à  $\phi(x)$ , est

$$\pi(x) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}(x)}$$

et la suite s'en déduit comme dans les cas des degrés de liberté dénombrables,

$$H(t) = \int d^3r \pi(t, \mathbf{r}) \dot{\phi}(t, \mathbf{r}) - L(t)$$

$$\dot{\phi}(t, \mathbf{r}) = \frac{\delta H(t)}{\delta \pi(t, \mathbf{r})}$$

$$\dot{\pi}(t, \mathbf{r}) = - \frac{\delta H(t)}{\delta \phi(t, \mathbf{r})}$$

et la quantification est réalisée en posant

$$[\phi_H(t, \mathbf{r}), \pi_H(t, \mathbf{r}')] = i\hbar \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

$$[\phi_H(t, \mathbf{r}), \phi_H(t, \mathbf{r}')] = 0,$$

$$[\pi_H(t, \mathbf{r}), \pi_H(t, \mathbf{r}')] = 0,$$

avec la dynamique

$$\dot{\phi}_H(t, \mathbf{r}) = (i\hbar)^{-1} [\phi_H(t, \mathbf{r}), H(t)],$$

$$\dot{\pi}_H(t, \mathbf{r}) = (i\hbar)^{-1} [\pi_H(t, \mathbf{r}), H(t)].$$

**12****Seconde quantification**

La seconde quantification est une formulation de la physique quantique qui permet aisément l'étude des systèmes à grand nombre de particules (électrons ou phonons dans les solides, champ électromagnétique, ...).

**Introduction d'un état du vide**

On considère tout d'abord un problème à une particule. L'équation de Schrödinger s'écrit

$$H\psi(\mathbf{r}) = i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r})$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

et l'équation aux valeurs propres est

$$Hu_\alpha(\mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}), \quad \alpha = 1, 2, \dots$$

L'ensemble des  $u_\alpha(\mathbf{r})$  forme une base complète,

$$\langle \mathbf{r} | \alpha \rangle = u_\alpha(\mathbf{r})$$

$$\langle \alpha' | \alpha \rangle = \int u_{\alpha'}^*(\mathbf{r}) u_\alpha(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{\alpha', \alpha}$$

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbb{1}.$$

Pour exprimer l'hamiltonien  $H$ , on peut choisir n'importe quelle base orthonormée de l'espace de Hilbert. Considérons le cas des ondes planes (normalisées dans le

volume  $L^3$  avec conditions aux bords périodiques), états propres du problème de la particule libre,  $H_0 = \mathbf{p}^2/2m$

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \\ u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

On peut ensuite écrire le potentiel dans la base choisie <sup>(21)</sup>,

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'| V(\mathbf{r}) |\mathbf{k}''\rangle \langle \mathbf{k}''| \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \langle \mathbf{k}'| V(\mathbf{r}) |\mathbf{k}''\rangle |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}''|, \\ \langle \mathbf{k}'| V(\mathbf{r}) |\mathbf{k}''\rangle &= \int u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}''}(\mathbf{r}) d^3r. \end{aligned}$$

Il apparaît un opérateur important,  $|\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}''|$ . Agissant sur un état  $|\mathbf{k}\rangle$ , il donne zéro, sauf si  $\mathbf{k} = \mathbf{k}''$  auquel cas il donne  $|\mathbf{k}'\rangle$ ,

$$|\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}''| \mathbf{k}\rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} |\mathbf{k}'\rangle.$$

On peut l'interpréter comme l'opérateur qui détruit un électron (par exemple) de l'état  $|\mathbf{k}''\rangle$  et en crée un dans l'état  $|\mathbf{k}'\rangle$ . Cela peut encore s'écrire différemment en introduisant un nouveau concept, *l'état du vide*,  $|0\rangle$ . On choisit cet état normé et orthogonal à tous les états propres à une particule,

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \langle \mathbf{k}|0\rangle = 0.$$

L'état du vide décrit une boîte vide et il n'est pas possible de l'écrire au sens des fonctions d'onde. On peut maintenant écrire algébriquement

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}''| &= |\mathbf{k}'\rangle \langle 0|0\rangle \langle \mathbf{k}''| \\ &= \underbrace{(|\mathbf{k}'\rangle \langle 0|)}_{c_{\mathbf{k}'}^\dagger} \underbrace{(|0\rangle \langle \mathbf{k}''|)}_{c_{\mathbf{k}''}} \\ &= c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}''}. \end{aligned}$$

On a interprété l'opérateur  $c_{\mathbf{k}''} = |0\rangle \langle \mathbf{k}''|$  comme l'opérateur annihilation d'un électron dans l'état  $|\mathbf{k}''\rangle$ , c'est-à-dire caractérisé par une fonction d'onde  $u_{\mathbf{k}''}(\mathbf{r})$ .

<sup>(21)</sup> Si l'on se limite à des positions discrètes,  $\mathbf{r}_i$ , la dernière intégrale peut s'écrire comme  $\langle \mathbf{k}'| V(\mathbf{r}) |\mathbf{k}''\rangle = \Delta\Omega \sum_i u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}_i) V(\mathbf{r}_i) u_{\mathbf{k}''}(\mathbf{r}_i)$  où  $\Delta\Omega$  est un volume par mode dans l'espace direct.

De même,  $c_{\mathbf{k}'}^\dagger = |\mathbf{k}'\rangle\langle 0|$  crée un électron dans l'état  $|\mathbf{k}'\rangle$ . On peut noter que ces opérateurs sont adjoint l'un de l'autre,  $(c_{\mathbf{k}})^\dagger = c_{\mathbf{k}}^\dagger$ ,  $(c_{\mathbf{k}}^\dagger)^\dagger = c_{\mathbf{k}}$ .

On peut maintenant écrire de nouveau le potentiel,

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}''}$$

où  $V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} = \langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}'' \rangle$ .

### Etats à un électron

Après l'état du vide,  $|0\rangle$ , on introduit les états à une particule, ce qui n'est rien d'autre qu'une ré-écriture des états propres de départ. Revenons à la notation initiale des états

$$\langle \mathbf{r} | \alpha \rangle = u_\alpha(\mathbf{r}), \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots$$

On choisit de représenter l'état  $|\alpha\rangle$  c'est-à-dire un électron dans l'état  $\alpha$  particulier, en précisant qu'il y a effectivement un électron dans cet état, et aucun dans les autres états,

$$|\alpha\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_\alpha, \dots\rangle.$$

On définit donc les états de base à une particule,

$$|1_1, 0_2, 0_3 \dots\rangle, |0_1, 1_2, 0_3 \dots\rangle, |0_1, 0_2, 1_3 \dots\rangle, \dots$$

De fait, l'action de  $c_{\alpha''} = |0\rangle\langle 0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha''}, \dots|$  sur un état quelconque combinaison linéaire d'états à une particule,

$$|\phi\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots\rangle, \quad a_{\alpha} = \langle 0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots | \phi \rangle$$

donne directement l'annihilation de la particule dans l'état  $u_{\alpha''}(\mathbf{r})$  :

$$\begin{aligned} c_{\alpha''} |\phi\rangle &= |0\rangle \langle 0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha''}, \dots | \phi \rangle \\ &= a_{\alpha''} |0\rangle \end{aligned}$$

et on retrouve l'état du vide (ce qui est parfaitement logique après avoir ôté 1 électron d'un système à 1 électron).

Pour étudier l'action d'un opérateur création, il faut faire attention au fait que lorsque l'on travaille dans ce formalisme (appelé formalisme d'occupation), on a étendu l'espace de Hilbert, puisqu'à côté des états  $|0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots\rangle$  on a introduit l'état du vide. Dans cet espace étendu, on peut décomposer un vecteur quelconque comme

$$|\phi\rangle = |0\rangle \langle 0 | \phi \rangle + \sum_{\alpha} |0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots\rangle \langle 0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots | \phi \rangle,$$

ce qui signifie que la relation de fermeture dans l'espace des états à *une particule au plus* s'écrit

$$|0\rangle \langle 0| + \sum_{\alpha} |0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots\rangle \langle 0_1, 0_2, \dots, 1_{\alpha}, \dots| = \mathbb{1}.$$

**Problème à deux électrons, à  $N$  électrons**

Après l'état du vide et les états à une particule, il nous faut introduire les états à deux particules. La fonction d'onde d'un système à deux électrons par exemple peut s'écrire comme un déterminant de Slater,

$$\psi_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} u_\alpha(\mathbf{r}_1) & u_\alpha(\mathbf{r}_2) \\ u_\beta(\mathbf{r}_1) & u_\beta(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \equiv |\alpha\beta|,$$

où les  $u_\alpha(\mathbf{r})$  sont toujours les états monoélectroniques.

Cette forme satisfait automatiquement à la contrainte d'antisymétrie de la fonction d'onde des fermions,  $|\beta\alpha| = -|\alpha\beta|$ . Introduisons maintenant les états en nombres de particules. On travaille dans un espace de Hilbert comprenant les états

$$\begin{aligned} &|0\rangle, \\ &|1_1, 0_2, 0_3, \dots\rangle, |0_1, 1_2, 0_3, \dots\rangle, |0_1, 0_2, 1_3, \dots\rangle, \dots \\ &|1_1, 1_2, 0_3, \dots\rangle, |1_1, 0_2, 1_3, \dots\rangle, \dots, |0_1, 1_2, 1_3, \dots\rangle, \dots \end{aligned}$$

Pour alléger l'écriture, on omet les zéros mais on indique le nombre total de particules concerné. On aura par exemple

$$\begin{aligned} |1 : \alpha\rangle &= |0_1, 0_2, \dots, 1_\alpha, \dots\rangle \\ |2 : \alpha, \beta\rangle &= |0_1, 0_2, \dots, 1_\alpha, \dots, 1_\beta, \dots\rangle, \end{aligned}$$

mais on conserve la numérotation des états dans un ordre donné (par exemple par valeurs croissantes de l'indice  $\alpha$ ), sans que cet ordre des états ne se réfère aucunement à l'ordre des particules (qui sont indiscernables en mécanique quantique). S'il s'agit de bosons, on pourra avoir des états du type

$$|2 : \alpha, \alpha\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 2_\alpha, \dots\rangle.$$

Avec ces notations, il est tentant de généraliser l'expression de l'opérateur d'annihilation<sup>(22)</sup>,  $c_\alpha = |0\rangle\langle 1 : \alpha|$ . Il faut toutefois tenir compte du fait que l'on peut aussi enlever un électron de fonction d'onde  $u_\alpha(\mathbf{r})$  d'un état comprenant initialement deux électrons, c'est-à-dire quelque chose comme  $|1 : \beta\rangle\langle 2 : \alpha, \beta|$ . Il faut cependant faire attention à respecter les relations de commutation entre opérateurs annihilation. Par exemple s'il s'agit d'électrons, il faut s'assurer que  $c_\alpha c_\beta = -c_\beta c_\alpha$ . On peut par exemple poser

$$\begin{aligned} c_\alpha &= A_\alpha |0\rangle\langle 1 : \alpha| + B_\alpha |1 : \beta\rangle\langle 2 : \alpha, \beta| \\ c_\beta &= A_\beta |0\rangle\langle 1 : \beta| + B_\beta |1 : \alpha\rangle\langle 2 : \alpha, \beta|. \end{aligned}$$

On effectue alors les combinaisons

$$\begin{aligned} c_\alpha c_\beta &= A_\alpha B_\beta |0\rangle\langle 2 : \alpha, \beta| \\ c_\beta c_\alpha &= A_\beta B_\alpha |0\rangle\langle 2 : \alpha, \beta|. \end{aligned}$$

<sup>(22)</sup> On se restreint à nouveau au cas de fermions.



Il suffit que  $A_\alpha = B_\beta = A_\beta = -B_\alpha = 1$  par exemple pour assurer la bonne relation d'anticommutation des fermions. On verra que de manière générale l'ensemble de ces relations de commutation sera satisfait pour des fermions si l'on fait le choix (la forme de l'opérateur création se déduit de l'adjoint de l'opérateur annihilation)

$$c_\alpha = \sum_{\substack{n_{\alpha'} \\ \alpha' \neq \alpha}} \theta_\alpha |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha'}, \dots, 0_\alpha, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_{\alpha'}, \dots, 1_\alpha, \dots|$$

$$c_\alpha^\dagger = \sum_{\substack{n_{\alpha'} \\ \alpha' \neq \alpha}} \theta_\alpha |n_1, n_2, \dots, n_{\alpha'}, \dots, 1_\alpha, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_{\alpha'}, \dots, 0_\alpha, \dots|$$

$$\theta_\alpha = (-1)^{\Sigma_\alpha}, \quad \Sigma_\alpha = \sum_{\alpha' < \alpha} n_{\alpha'}, \quad \forall \alpha, n_\alpha = 0 \text{ ou } 1.$$

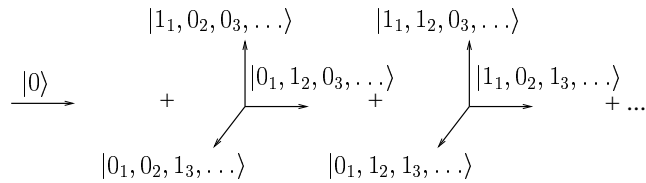
Dans ce qui précède nous nous étions limités à 0, 1 ou 2 fermions, mais on a maintenant généralisé à un espace de Hilbert à  $N$  fermions dans lequel la relation de fermeture devient<sup>(23)</sup>

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= |0\rangle \langle 0|\phi\rangle + \sum_\alpha |1:\alpha\rangle \langle 1:\alpha|\phi\rangle \\ &+ \sum_{\alpha,\beta} |2:\alpha,\beta\rangle \langle 2:\alpha,\beta|\phi\rangle + \sum_{\alpha,\beta,\gamma} |3:\alpha,\beta,\gamma\rangle \langle 3:\alpha,\beta,\gamma|\phi\rangle + \dots \\ |0\rangle \langle 0| &+ \sum_\alpha |1:\alpha\rangle \langle 1:\alpha| \\ &+ \sum_{\alpha,\beta} |2:\alpha,\beta\rangle \langle 2:\alpha,\beta| + \sum_{\alpha,\beta,\gamma} |3:\alpha,\beta,\gamma\rangle \langle 3:\alpha,\beta,\gamma| + \dots = \mathbb{1}, \end{aligned}$$

L'action des  $c_\alpha$  et  $c_\alpha^\dagger$  se résume à <sup>(24)</sup>

$$\begin{aligned} c_\alpha |0_\alpha\rangle &= 0 & c_\alpha |1_\alpha\rangle &= (-1)^{\Sigma_\alpha} |0_\alpha\rangle & (c_\alpha)^2 &= 0 \\ c_\alpha^\dagger |0_\alpha\rangle &= (-1)^{\Sigma_\alpha} |1_\alpha\rangle & c_\alpha^\dagger |1_\alpha\rangle &= 0 & (c_\alpha^\dagger)^2 &= 0 \end{aligned}$$

<sup>(23)</sup> ce que l'on peut représenter symboliquement par le diagramme suivant :



<sup>(24)</sup> Ici la notation  $|0_\alpha\rangle$  ou  $|1_\alpha\rangle$  se réfère uniquement à l'occupation du mode  $\alpha$ , les populations de tous les autres modes étant arbitraires et n'intervenant que dans les facteurs  $(-1)^{\Sigma_\alpha}$ .

et les relations d'anticommutation des fermions sont vérifiées,

$$\begin{aligned}\{c_\alpha, c_{\alpha'}\} &= 0, \\ \{c_\alpha^\dagger, c_{\alpha'}^\dagger\} &= 0, \\ \{c_\alpha, c_{\alpha'}^\dagger\} &= \delta_{\alpha, \alpha'},\end{aligned}$$

où  $\{c_\alpha, c_{\alpha'}\} = c_\alpha c_{\alpha'} + c_{\alpha'} c_\alpha$ .

### Propriétés systématiques des opérateurs de création et annihilation de fermions

Partons des relations d'anticommutation des fermions,  $\{c_\alpha, c_{\alpha'}\} = 0$ ,  $\{c_\alpha^\dagger, c_{\alpha'}^\dagger\} = 0$ ,  $\{c_\alpha^\dagger, c_{\alpha'}\} = \delta_{\alpha, \alpha'}$  et de l'état du vide,  $|0\rangle$  tel que  $c_\alpha^\dagger c_\alpha |0\rangle = 0$ . On a donc plus simplement  $c_\alpha |0\rangle = 0$ . Soit le vecteur  $c_\alpha^\dagger |0\rangle$ , on a

$$\begin{aligned}c_\alpha^\dagger c_\alpha (c_\alpha^\dagger |0\rangle) &= c_\alpha^\dagger (1 + c_\alpha^\dagger c_\alpha) |0\rangle \\ &= c_\alpha^\dagger |0\rangle,\end{aligned}$$

soit  $c_\alpha^\dagger |0\rangle = |1\rangle$ . Sur ce nouvel état, l'action répétée de  $c_\alpha^\dagger$  donne zéro, puisque  $c_\alpha^\dagger |1\rangle = c_\alpha^\dagger c_\alpha^\dagger |0\rangle = 0$  car  $\{c_\alpha^\dagger, c_\alpha^\dagger\} = 2c_\alpha^\dagger = 0$ . Il reste à faire agir

$$\begin{aligned}c_\alpha |1\rangle &= c_\alpha c_\alpha^\dagger |0\rangle \\ &= (1 - c_\alpha^\dagger c_\alpha) |0\rangle \\ &= |0\rangle.\end{aligned}$$

Dans la base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , on a donc

$$[c_\alpha] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad [c_\alpha^\dagger] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

L'opérateur  $c_\alpha^\dagger c_\alpha$  est appelé opérateur "nombre de particules" et dans cette même base il est donné par la matrice

$$[c_\alpha^\dagger c_\alpha] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Lorsqu'on a affaire à des fermions, il ne peut y avoir que zéro ou une particule par état quantique. C'est ce que recouvre le principe de Pauli.

### Cas des bosons

Si les particules auxquelles on s'intéresse sont des bosons, les relations de commutation sont différentes,

$$\begin{aligned}[a_\alpha, a_{\alpha'}] &= 0, \\ [a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger] &= 0, \\ [a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger] &= \delta_{\alpha, \alpha'},\end{aligned}$$

où  $[a_\alpha, a_{\alpha'}] = a_\alpha a_{\alpha'} - a_{\alpha'} a_\alpha$ . De la même manière que dans le cas des fermions, les relations de commutation suffisent à déterminer l'action de ces opérateurs en représentation d'occupation.

Soit  $|n\rangle$  un état propre de  $a_\alpha^\dagger a_\alpha$ ,  $a_\alpha^\dagger a_\alpha |n\rangle = n|n\rangle$ . La valeur de  $n$  est a priori réelle et positive, puisque  $a_\alpha^\dagger a_\alpha$  est un opérateur hermitien ( $(a_\alpha^\dagger)^\dagger = a_\alpha$ ) et positif ( $\langle n|a_\alpha^\dagger a_\alpha|n\rangle = |a_\alpha|n\rangle|^2 = n$ ). On forme

$$\begin{aligned} (a_\alpha^\dagger a_\alpha) a_\alpha |n\rangle &= a_\alpha (a_\alpha^\dagger a_\alpha) |n\rangle - a_\alpha |n\rangle \\ &= (n-1) a_\alpha |n\rangle \end{aligned}$$

ce qui prouve que  $a_\alpha |n\rangle$  est également vecteur propre de  $a_\alpha^\dagger a_\alpha$ , mais avec une valeur propre diminuée de 1. Il faut alors imposer à  $n$  d'être entier positif ou nul car sinon par actions successives de l'opérateur d'annihilation  $a_\alpha$ , on atteindrait un état associé à une valeur propre de  $a_\alpha^\dagger a_\alpha$  négative. En revanche, avec  $n$  entier, on est assuré d'atteindre l'état du vide qui est lui-même annihilé par  $a_\alpha$ . Il est naturel de poser  $a_\alpha |n\rangle = x|n-1\rangle$ . En travaillant avec des états normés, on a donc  $\langle n|a_\alpha^\dagger a_\alpha|n\rangle = n = |x|^2$ , soit, en retenant la détermination réelle positive,

$$a_\alpha |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle.$$

On peut montrer de même <sup>(25)</sup> que

$$a_\alpha^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

Dans la base  $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ , on a donc

$$[a_\alpha] = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ \vdots & & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}, \quad [a_\alpha^\dagger] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ \vdots & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \end{pmatrix}.$$

L'opérateur  $a_\alpha^\dagger a_\alpha$  est de nouveau appelé opérateur "nombre de particules" et dans cette même base il est donné par la matrice diagonale

$$[a_\alpha^\dagger a_\alpha] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Comme il s'agit cette fois de bosons, il peut y avoir un nombre arbitraire de particules par état quantique.

Au total, on peut produire un état quelconque dans le formalisme d'occupation par applications répétées des opérateurs création sur le vide,

$$\begin{aligned} \text{bosons} \quad |n\rangle &= \frac{(a_\alpha^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \\ \text{fermions} \quad |n\rangle &= (c_\alpha^\dagger)^n |0\rangle. \end{aligned}$$

<sup>(25)</sup> On effectue  $(a_\alpha^\dagger a_\alpha) a_\alpha^\dagger |n\rangle = a_\alpha^\dagger (1 + a_\alpha^\dagger a_\alpha) |n\rangle = (n+1) |n\rangle$ , soit  $a_\alpha^\dagger |n\rangle = y|n+1\rangle$  et  $\langle n|a_\alpha a_\alpha^\dagger|n\rangle = n+1 = |y|^2$ .

Dans le premier cas, les valeurs de  $n$  permises sont les entiers positifs ou nuls alors que dans le deuxième cas  $n$  vaut 0 ou 1. Pour des états à  $N$  particules, on généralise ces relations,

$$\text{bosons} \quad |n_1, n_2, \dots, n_\alpha\rangle = \frac{(a_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \dots \frac{(a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{(a_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} |0\rangle,$$

$$\text{fermions} \quad |n_1, n_2, \dots, n_\alpha\rangle = (c_\alpha^\dagger)^{n_\alpha} \dots (c_2^\dagger)^{n_2} (c_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle.$$

L'ordre d'application des opérateurs est important.

### Opérateurs en seconde quantification

Les opérateurs peuvent s'exprimer en formalisme d'occupation en fonction des opérateurs création et annihilation. On a vu par exemple que l'on pouvait écrire, pour un hamiltonien de la forme

$$H = \sum_i \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right)$$

le potentiel sous la forme

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}$$

où  $V_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} = \langle \mathbf{k}\sigma | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}'\sigma' \rangle$ . Pour l'énergie cinétique, comme

$$N_{\mathbf{k}, \sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

représente le nombre de particules de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  (donc d'énergie  $\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ ) et de spin  $\sigma$ , on a simplement la forme diagonale (parce qu'on travaille avec les états  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ) suivante

$$\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

Pour l'impulsion totale on aurait de même

$$\sum_i \mathbf{p}_i = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hbar \mathbf{k} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

et pour le nombre total de particules,

$$N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

De manière générale, on admettra que tout opérateur à une particule s'écrit comme l'énergie potentielle  $V(\mathbf{r}_i)$

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}$$

où (dans le cas d'un potentiel indépendant du spin)

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} &= \langle \mathbf{k}\sigma | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k}'\sigma' \rangle \\ &= \delta_{\sigma, \sigma'} \int d^3r u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Tant que l'on reste dans un formalisme non relativiste où le nombre de particules se conserve, on doit voir apparaître autant de  $c^\dagger$  que de  $c$ , mais on admettra ici que les opérateurs monoparticulaires ne comportent que des termes en  $c^\dagger c$ .

Le cas des opérateurs faisant intervenir les coordonnées relatives de 2 particules, comme les termes d'interaction,

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j),$$

est plus complexe. On montre qu'alors (en omettant le spin cette fois)

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}''} c_{\mathbf{k}'''}$$

où cette fois

$$V_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', \mathbf{k}''\sigma'', \mathbf{k}'''\sigma'''} = \int d^3r_i d^3r_j u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_i) u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}_j) V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) u_{\mathbf{k}''}(\mathbf{r}_j) u_{\mathbf{k}'''}(\mathbf{r}_i).$$

### Opérateurs de champ à $N$ électrons

Revenons à la base des états propres de l'impulsion,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  <sup>(26)</sup>. On introduit les opérateurs création et annihilation dans cette base, et l'on tient compte explicitement du spin de l'électron. Soit  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  l'opérateur qui ajoute au système un fermion d'impulsion  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  et de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ . L'amplitude de trouver au point  $\mathbf{r}$  une particule créée par cet opérateur est  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ . Pour ajouter au système une particule de spin  $\sigma$  et d'impulsion quelconque, on développe sur la base des états propres de l'impulsion, ce qui définit un opérateur de champ <sup>(27)</sup>

$$\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger.$$

<sup>(26)</sup> On choisit de travailler dans une boîte avec des états discrets.

<sup>(27)</sup> On a ici une relation entre opérateurs de création  $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$  et  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  qui est très voisine de la relation entre fonctions d'onde en base de position et d'impulsion. En effet, soit  $|\varphi\rangle$  un vecteur d'état. Dans la base de position, la fonction d'onde est notée  $\varphi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varphi \rangle$  et dans la base d'impulsion, elle est écrite  $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | \varphi \rangle$  (les états  $\mathbf{k}$  sont discrets, puisque l'on a choisi de travailler dans une boîte). On passe d'une base à l'autre par transformation de Fourier,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \varphi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}},$$

où l'analogie devient évidente.

De même, on retire une particule de spin  $\sigma$  au point  $\mathbf{r}$  par l'action de

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} L^{-3/2} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

On peut noter que

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') + \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} L^{-3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \underbrace{(c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger + c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma})}_{\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} L^{-3} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \delta_{\sigma, \sigma'} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma, \sigma'}, \end{aligned}$$

c'est-à-dire que les opérateurs de champ obéissent aux relations d'anticommutation des fermions,

$$\begin{aligned} \{\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\} &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma, \sigma'}, \\ \{\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\} &= 0, \\ \{\psi_\sigma(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} &= 0. \end{aligned}$$

A l'aide de cette notation, si la théorie de départ est une théorie dynamique quantique à une particule (Schrödinger, Klein-Gordon, Dirac...), quantifier un champ revient à remplacer la fonction d'onde par un opérateur de champ. Si la théorie initiale est une théorie des champs classique (électromagnétisme), elle est quantifiée en remplaçant le champ classique par un opérateur de champ.

### Etats localisés à $N$ particules

A partir des opérateurs de champ, on peut créer de nouveaux états localisés par action sur le vide. Commençons par définir l'état localisé à une particule de spin  $\sigma_1$  au point  $\mathbf{r}_1$  :

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_1 \sigma_1\rangle &\equiv \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} c_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} |1_{\mathbf{k}\sigma_1}\rangle \\ &= \text{amplitude de trouver la particule au point } \mathbf{r}_1 \\ &\quad \text{avec un spin } \sigma_1 \end{aligned}$$

On s'interroge maintenant sur l'état localisé à deux fermions,

$$\begin{aligned}
 \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2)|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}_2} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} c_{\mathbf{k}'\sigma_2}^\dagger \underbrace{c_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger |0\rangle}_{|1_{\mathbf{k}\sigma_1}\rangle} \\
 &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}_2} L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} |1_{\mathbf{k}\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}'\sigma_2}\rangle \\
 &= \text{amplitude de trouver la particule 1 au point } \mathbf{r}_1 \text{ avec} \\
 &\quad \text{un spin } \sigma_1 \text{ et la particule 2 au point } \mathbf{r}_2 \text{ avec} \\
 &\quad \text{un spin } \sigma_2 \text{ ou l'inverse} \\
 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \underbrace{|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle}_{\text{part. 1}} \otimes \underbrace{|\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle}_{\text{part. 2}} - \underbrace{|\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle}_{\text{part. 1}} \otimes \underbrace{|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle}_{\text{part. 2}} \right) \\
 &\equiv |\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle.
 \end{aligned}$$

C'est matière de convention que d'écrire ici  $|\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle$  au lieu de  $|\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2\rangle$ , mais une fois ce choix effectué, il faut s'y tenir. La notation ci-dessus doit être comprise. Le vecteur  $|\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle$  est dans un sous-espace de l'espace produit tensoriel des espaces des états monoparticulaires  $\mathcal{E}_{\text{particule 1}} \otimes \mathcal{E}_{\text{particule 2}}$ . Les états  $|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle$  sont les états localisés à  $n$  particules,

$$|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle = \psi_{\sigma_n}^\dagger(\mathbf{r}_n) \dots \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1)|0\rangle.$$

Ils sont donnés par les combinaisons linéaires d'états  $|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle \otimes |\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{r}_n\sigma_n\rangle$  convenablement symétrisées pour satisfaire les propriétés des fermions.

Il s'agit là de l'état dans lequel un électron de spin  $\sigma_1$  est au point  $\mathbf{r}_1$ , un électron de spin  $\sigma_2$  est au point  $\mathbf{r}_2, \dots$  et un électron de spin  $\sigma_n$  est au point  $\mathbf{r}_n$ . Ces états forment une base très pratique pour les systèmes à  $N$  particules, car ils sont correctement symétrisés grâce aux relations d'anticommutation des opérateurs de champ. Par exemple,

$$|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_3\sigma_3, \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2\rangle = -|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_3\sigma_3, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle$$

car  $\psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2)\psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) = -\psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1)\psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2)$ .

L'ensemble des états  $\{|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle\}$  forme un sous-espace (appelé espace de Fock) de l'espace produit tensoriel  $\{|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle \otimes |\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{r}_n\sigma_n\rangle\}$  d'états monoparticulaires. On peut maintenant construire un état antisymétrique à  $n$  particules  $|\phi\rangle$  dans lequel les particules ont pour fonction d'onde  $\varphi(\mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ . Cet état est la somme cohérente d'états localisés  $|\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle$  avec les phases  $\varphi(\mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ ,

$$|\phi\rangle = \int \prod_{i=1}^n d^3r_i \varphi(\mathbf{r}_n, \dots, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) |\mathbf{r}_n\sigma_n, \dots, \mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle.$$

Par exemple le déterminant de Slater à deux particules est donné par (on omet le spin)

$$\begin{aligned}
 |\alpha\beta\rangle &= \langle \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | 1_\alpha, 1_\beta \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \mathbf{r}_1 | \otimes \langle \mathbf{r}_2 | - \langle \mathbf{r}_2 | \otimes \langle \mathbf{r}_1 |) | 1_\alpha, 1_\beta \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_\alpha(\mathbf{r}_1)u_\beta(\mathbf{r}_2) - u_\alpha(\mathbf{r}_2)u_\beta(\mathbf{r}_1)).
 \end{aligned}$$

On pourrait bien entendu travailler dans un espace de Fock adapté aux bosons en nous limitant aux combinaisons linéaires symétriques par permutations, par exemple

$$|\mathbf{r}_2\sigma_2, \mathbf{r}_1\sigma_1\rangle_{\text{bosons}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \underbrace{|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle}_{\text{part. 1}} \otimes \underbrace{|\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle}_{\text{part. 2}} + \underbrace{|\mathbf{r}_2\sigma_2\rangle}_{\text{part. 1}} \otimes \underbrace{|\mathbf{r}_1\sigma_1\rangle}_{\text{part. 2}} \right),$$

et le formalisme se développe ensuite de manière voisine.

### Lagrangien de Schrödinger

Nous allons montrer ici comment on construit une théorie quantique des champs. On construit tout d'abord la théorie classique (nous considérerons le cas de la théorie classique associée à l'équation de Schrödinger), puis on passe à la théorie quantique associée en utilisant les prescriptions de quantification canonique, c'est-à-dire en considérant les champs non plus comme classiques, mais comme des opérateurs obéissant aux règles de commutation canoniques.

La densité lagrangienne de Schrödinger (due à Jordan-Wigner) est donnée par

$$\mathcal{L}(\psi, \dot{\psi}, \psi^*, \dot{\psi}^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*) = i\hbar\psi^*\dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi) - V(\mathbf{r}, t)\psi^*\psi$$

Ce n'est pas une quantité hermitienne. Les champs  $\psi$  et  $\psi^*$  sont fonction de l'espace et du temps,  $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ . Par application des équations d'Euler-Lagrange à  $\psi$ , on obtient

$$-i\hbar\dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi^* + V(\mathbf{r}, t)\psi^*$$

et par application à  $\psi^*$ ,

$$i\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi + V(\mathbf{r}, t)\psi,$$

c'est-à-dire l'équation de Schrödinger et sa conjuguée. Le moment canonique est donné par

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar\psi^*$$

et la densité hamiltonienne

$$\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L} = \frac{-i\hbar}{2m}(\vec{\nabla}\pi) \cdot (\vec{\nabla}\psi) - \frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r}, t)\pi\psi.$$

L'hamiltonien (classique) total vaut

$$H = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi) + V(\mathbf{r}, t)\psi^*\psi \right] d^3r.$$

Par intégration par parties du premier terme on obtient la forme habituelle

$$H = \int \psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\mathbf{r}, t) \right] \psi d^3r = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle.$$



On retrouve ainsi l'élément de matrice de l'Hamiltonien de Schrödinger (ici noté  $\hat{H}$ ) dans l'état  $|\psi\rangle$ , résultat finalement très naturel.

Pour quantifier l'hamiltonien, on remplace les fonctions  $\psi(\mathbf{r}, t)$  et  $\psi^*(\mathbf{r}, t)$  par des opérateurs de champ (on néglige le spin)  $\psi(\mathbf{r}, t)$  et  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$  tels que

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ [\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}', t)] &= 0, \\ [\psi^\dagger(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= 0. \end{aligned}$$

L'hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} H &= \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Considérons l'état  $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)|0\rangle$  qui crée à partir du vide une particule localisée au point  $\mathbf{r}, t$ . Le problème consiste à construire un état propre de  $H$ . Pour cela considérons l'état

$$\int d^3r \varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle,$$

$\varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle$  représente une particule créée au point  $\mathbf{r}, t$  avec une amplitude  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  (c'est une fonction ordinaire) et on somme sur tout l'espace. On cherche la contrainte satisfaite par la fonction  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  pour que l'état considéré soit état propre de l'hamiltonien d'énergie  $E$  :

$$H \int d^3r \varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle = E \int d^3r \varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle.$$

On peut exprimer le premier membre

$$\begin{aligned} \int d^3r' d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H} \varphi(\mathbf{r}, t) \underbrace{\psi(\mathbf{r}', t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}', t)} |0\rangle &= \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H} \varphi(\mathbf{r}, t) |0\rangle \\ &= \int d^3r \hat{H} \varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle \end{aligned}$$

qui vaut

$$\int d^3r E \varphi(\mathbf{r}, t) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) |0\rangle$$

à condition que la fonction  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  satisfasse à l'équation originale de Schrödinger

$$\hat{H} \varphi(\mathbf{r}, t) = E \varphi(\mathbf{r}, t).$$

Cela fournit le lien entre l'approche ordinaire de la mécanique quantique et celle d'une théorie des champs.

**78**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

# 13

## Champ de photons, quantification du champ électromagnétique

Pour quantifier le champ électromagnétique, il est nécessaire d'avoir recours à la seconde quantification, car le champ électromagnétique est un système dans lequel le nombre de particules (photons) n'est pas conservé. Dans ce sens il n'y a pas de fonction d'onde du champ électromagnétique, mais le potentiel vecteur  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  joue un rôle un peu équivalent. En mécanique quantique, cela devient véritablement un opérateur de champ, ou champ quantique qui obéit à une équation dynamique relativiste (l'analogie de l'équation de Schrödinger), l'équation des ondes.

### Quantification du champ

Le champ électromagnétique classique dans une cavité se décompose en modes de Fourier,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\epsilon} \left[ \alpha_{\mathbf{q}\epsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\epsilon} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)} + \alpha_{\mathbf{q}\epsilon}^* \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\epsilon}^* e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)} \right].$$

La dépendance temporelle, avec  $\omega_{\mathbf{q}} = c|\mathbf{q}|$ , provient de ce que les amplitudes des modes doivent satisfaire l'équation des ondes. La jauge de Coulomb impose une polarisation transverse,  $\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\epsilon} = 0$ . La somme sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  est continue si l'on travaille dans l'espace infini,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int d^3q \sum_{\epsilon} \left[ \alpha_{\mathbf{q}\epsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\epsilon} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)} + \alpha_{\mathbf{q}\epsilon}^* \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\epsilon}^* e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)} \right].$$

L'énergie totale peut s'écrire sous la forme d'une somme d'oscillateurs harmoniques de masse unité (un oscillateur pour chaque mode),

$$U = L^3 \int d^3q \sum_{\epsilon} \frac{1}{2} (\omega_{\mathbf{q}}^2 Q_{\mathbf{q}\epsilon}^2 + P_{\mathbf{q}\epsilon}^2),$$

en écrivant les modes normaux sous la forme

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} &= (4\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{q}}^2)^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} Q_{\mathbf{q}\varepsilon} + iP_{\mathbf{q}\varepsilon}] \\ \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* &= (4\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{q}}^2)^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} Q_{\mathbf{q}\varepsilon} - iP_{\mathbf{q}\varepsilon}].\end{aligned}$$

La procédure de quantification canonique consiste à remplacer les variables conjuguées  $Q_{\mathbf{q}\varepsilon}$  et  $P_{\mathbf{q}\varepsilon}$  par les opérateurs correspondants en représentation d'Heisenberg,  $\hat{Q}_{\mathbf{q}\varepsilon}$  et  $\hat{P}_{\mathbf{q}\varepsilon}$ , en imposant les conditions de commutation canonique

$$[\hat{Q}_{\mathbf{q}\varepsilon}, \hat{P}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}] = i\hbar\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}$$

pour un même mode. On définit ensuite les opérateurs annihilation et création, adjoint l'un de l'autre,

$$\begin{aligned}a_{\mathbf{q}\varepsilon} &= (2\hbar\omega_{\mathbf{q}})^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} \hat{Q}_{\mathbf{q}\varepsilon} + i\hat{P}_{\mathbf{q}\varepsilon}] \\ a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger &= (2\hbar\omega_{\mathbf{q}})^{-1/2} [\omega_{\mathbf{q}} \hat{Q}_{\mathbf{q}\varepsilon} - i\hat{P}_{\mathbf{q}\varepsilon}]\end{aligned}$$

qui obéissent à

$$\begin{aligned}[a_{\mathbf{q}\varepsilon}, a_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^\dagger] &= \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\delta_{\varepsilon,\varepsilon'} \\ [a_{\mathbf{q}\varepsilon}, a_{\mathbf{q}'\varepsilon'}] &= 0 \\ [a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger, a_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^\dagger] &= 0\end{aligned}$$

et qui correspondent aux modes classiques par la substitution

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{q}\varepsilon} &\rightarrow \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} a_{\mathbf{q}\varepsilon} \\ \alpha_{\mathbf{q}\varepsilon}^* &\rightarrow \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger\end{aligned}$$

On en déduit la forme de l'hamiltonien <sup>(28)</sup>, de l'impulsion totale et du nombre de particules associés au champ,

$$\begin{aligned}H &= \int d^3q \sum_{\varepsilon} \hbar\omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger a_{\mathbf{q}\varepsilon} \\ P &= \int d^3q \sum_{\varepsilon} \hbar\mathbf{q} a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger a_{\mathbf{q}\varepsilon} \\ N &= \int d^3q \sum_{\varepsilon} a_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger a_{\mathbf{q}\varepsilon}\end{aligned}$$

<sup>(28)</sup> Le facteur  $\frac{1}{2}\hbar\omega_{\mathbf{q}}$  a disparu en choisissant de fixer l'énergie du vide à zéro.

et finalement celle du potentiel vecteur quantifié

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \int d^3q \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} [a_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} + a_{\mathbf{q}\varepsilon}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} e^{i\omega_{\mathbf{q}}t}].$$

On peut noter que cette expression représente le potentiel vecteur en représentation de Heisenberg,  $\mathbf{A}_H(\mathbf{r}, t)$  <sup>(29)</sup>. On a donc  $a_{\mathbf{q}\varepsilon}^{\dagger}(t) = a_{\mathbf{q}\varepsilon}^{\dagger} e^{i\omega t}$  et  $a_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) = a_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{-i\omega t}$  soit, en prenant  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, 0)$ , l'expression correspondante en représentation de Schrödinger

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \int d^3q \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} [a_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}\varepsilon}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}].$$

### Etats propres du champ

Un état du champ  $|\dots, n_{\mathbf{q}\varepsilon}, \dots\rangle$  est à comprendre comme la forme

$$|\dots, n_{\mathbf{q}\varepsilon}, \dots\rangle = \bigotimes_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i} |n_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i}\rangle$$

Par abus de notation, lorsque l'on écrit simplement  $|n_{\mathbf{q}\varepsilon}\rangle$ , c'est que l'on travaille sur un mode spécifique, omettant de mentionner les populations des autres modes qui restent inchangées (et d'ailleurs éventuellement nulles si on travaille sur un mode pur du champ). L'action des opérateurs création ou annihilation est donc à comprendre comme

$$a_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i} |\dots, n_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i}, n_{\mathbf{q}_{i+1} \varepsilon_{i+1}}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i}} |\dots, n_{\mathbf{q}_i \varepsilon_i} - 1, n_{\mathbf{q}_{i+1} \varepsilon_{i+1}}, \dots\rangle$$

<sup>(29)</sup> Avec l'hamiltonien  $H = \sum \hbar \omega a^{\dagger} a$  ci-dessus, l'équation d'évolution des opérateurs création et annihilation donne

$$\frac{d}{dt} a_H^{\dagger}(t) = (i\hbar)^{-1} [a_H^{\dagger}(t), H] = i\omega a_H^{\dagger}(t)$$

que l'on intègre en

$$a_H^{\dagger}(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) a^{\dagger} \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = e^{i\omega t} a^{\dagger}$$

$$a_H(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) a \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = e^{-i\omega t} a$$

et finalement

$$\mathbf{A}_H(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \int d^3q \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} [a_{\mathbf{q}\varepsilon}(t) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}\varepsilon}^{\dagger}(t) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}].$$

ou en notation compacte, en notant  $\mathbf{k}\lambda$  le mode spécifique avec lequel on travaille,

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}}|n_{\mathbf{k}\lambda} - 1\rangle, \\ a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1}|n_{\mathbf{k}\lambda} + 1\rangle, \\ a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= n_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle, \end{aligned}$$

d'où l'on déduit par exemple l'action sur des modes purs du champ

$$\begin{aligned} N|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= n_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle, \\ H|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= \hbar\omega_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle, \\ P|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle &= \hbar\mathbf{k}n_{\mathbf{k}\lambda}|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle. \end{aligned}$$

### Etats cohérents du champ

Les états cohérents du champ électromagnétique sont des états propres de l'opérateur annihilation,  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = \alpha_{\mathbf{k}\lambda}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  où  $\alpha_{\mathbf{k}\lambda}$  est complexe. On pose  $|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$ , soit

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} c_n \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}}|n_{\mathbf{k}\lambda} - 1\rangle = \alpha_{\mathbf{k}\lambda} \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} c_n|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle,$$

$$c_1\sqrt{1}|0_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + c_2\sqrt{2}|1_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + c_3\sqrt{3}|2_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + \dots = \alpha_{\mathbf{k}\lambda}c_0|0_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + \alpha_{\mathbf{k}\lambda}c_1|1_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + \alpha_{\mathbf{k}\lambda}c_2|2_{\mathbf{k}\lambda}\rangle + \dots$$

On en déduit

$$c_1 = \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}}{\sqrt{1}}c_0, \quad c_2 = \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^2}{\sqrt{1.2}}c_0, \quad c_3 = \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^3}{\sqrt{1.2.3}}c_0, \dots$$

ou  $c_n = \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^n}{\sqrt{n!}}c_0$ . La normation impose

$$\langle\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = 1 = \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} |c_n|^2 = \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^{2n}}{n!} |c_0|^2 = e^{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2} |c_0|^2.$$

Finalement,

$$|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2/2} \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^n}{\sqrt{n!}} |n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle.$$

La probabilité  $\mathcal{P}_{n_{\mathbf{k}\lambda}} = |\langle n_{\mathbf{k}\lambda}|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle|^2$  d'avoir  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  photons dans l'état cohérent  $|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  vaut directement  $|c_n|^2$  soit

$$\mathcal{P}_{n_{\mathbf{k}\lambda}} = \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2}$$

et la moyenne  $\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda} = \langle \alpha_{\mathbf{k}\lambda} | \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} | \alpha_{\mathbf{k}\lambda} \rangle = \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} n |c_n|^2 = e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2} \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}} \frac{(|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2)^{n-1}}{(n-1)!} |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2 = |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2$ .

L'origine de la dénomination d'états quasi-classiques pour les états cohérents provient de ce que la moyenne dans un tel état de l'opérateur champ électrique par exemple prend une forme identique à l'expression classique du champ électrique pour une onde monochromatique. Pour exprimer cette moyenne, on commence par exprimer l'évolution temporelle  $|\psi(t)\rangle$  d'un état pris à  $t = 0$  dans un état cohérent,  $|\psi(0)\rangle = |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$ . La dynamique d'un tel état est gouvernée par l'hamiltonien du champ monomode libre  $\hat{H}_{\text{chp}} = \hbar\omega(\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2})$ , dont les états propres sont les états "nombre"  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$ . On a alors

$$|\psi(t)\rangle = e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2/2} \sum_{n_{\mathbf{k}\lambda}=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle,$$

d'où découle l'action de l'opérateur annihilation sur un tel état,

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} |\psi(t)\rangle = \alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega t} |\psi(t)\rangle.$$

On en déduit également l'expression adjointe,

$$\langle \psi(t) | \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{i\omega t} \langle \psi(t) |.$$

Il suffit alors de calculer la valeur moyenne de

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}$$

dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ , soit

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \mathbf{A}(\mathbf{r}) | \psi(t) \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega}} (\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + \alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \\ &= (A_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + A_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}. \end{aligned}$$

Pour un champ classique, on aurait une expression analogue,

$$\mathbf{A}_{\text{classq}}(\mathbf{r}, t) = (A_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + A_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}) \hat{\mathbf{e}}$$

qui conduit à un champ électrique

$$\mathbf{E}_{\text{classq}}(\mathbf{r}, t) = (-i\omega A_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + i\omega A_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}) \hat{\mathbf{e}}.$$

C'est une expression réelle. Le carré du champ (moyenné sur le temps) donne

$$\langle \mathbf{E}_{\text{classq}}^2(\mathbf{r}, t) \rangle = 2\omega^2 |A_0|^2,$$

l'amplitude du champ électrique vaut alors  $E_0 = \sqrt{2}\omega |A_0|$  et la densité d'énergie associée  $\frac{1}{2}\varepsilon_0 E_0^2$ . En mettant à profit le fait que dans la correspondance avec la moyenne quantique on a  $A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega}} \alpha_{\mathbf{k}\lambda}$ , on obtient  $\frac{1}{2}\varepsilon_0 E_0^2 \rightarrow \frac{1}{2}\varepsilon_0 2 \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3} |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}|^2$  soit finalement en introduisant le nombre moyen de photons,

$$\frac{1}{2}\varepsilon_0 E_0^2 \rightarrow \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{L^3} \bar{n}_{\mathbf{k}\lambda}.$$

Une autre contribution identique à la densité d'énergie proviendrait du champ magnétique.





## **Sections efficaces**



# 14

## Etats de diffusion à 1d

Le problème de base de la diffusion peut être présenté par les états de diffusion d'un potentiel unidimensionnel, par exemple un puits fini de largeur  $2a$  et de profondeur  $-V_0$ . Le potentiel est choisi nul en dehors du puits. On choisit des énergies positives,  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  et on utilise la paramétrisation  $V_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ ,  $q^2 = k_0^2 + k^2$ .

La symétrie du problème est brisée dès lors que l'on considère que des particules incidentes d'énergie  $E$  arrivent de  $-\infty$  et se dirigent vers les  $x$  croissants, il est donc inutile de chercher à symétriser le potentiel et les solutions de l'équation de Schrödinger. Ces solutions précisément peuvent s'écrire

$$\begin{aligned} \text{si } x \leq 0 \quad \psi_1(x) &= e^{ikx} + r e^{-ikx} \\ \text{si } 0 \leq x \leq 2a \quad \psi_2(x) &= A e^{iqx} + B e^{-iqx} \\ \text{si } 2a \leq x \quad \psi_3(x) &= e^{ik(x-2a)} \end{aligned}$$

Le facteur de phase  $e^{2ika}$  ne change rien au module de la fonction d'onde, mais simplifie les équations de continuité :

$$\begin{aligned} 1 + r &= A + B \\ 1 - r &= \frac{q}{k}(A - B) \\ t &= A e^{2iqa} + B e^{-2iqa} \\ t &= \frac{q}{k}(e^{2iqa} A - B e^{-2iqa}) \end{aligned}$$

Par somme des deux premières équations et différence des deux dernières on obtient un système avec second membre,

$$\begin{aligned} A(1 + q/k) + B(1 - q/k) &= 2, \\ A(1 - q/k)e^{2iqa} + B(1 + q/k)e^{-2iqa} &= 0. \end{aligned}$$

Le déterminant vaut  $D = 4(q/k) \cos 2qa - 2i(1 + (q/k)^2) \sin 2qa$  et la solution pour  $A$  et  $B$  est donc

$$\begin{aligned} A &= 2D^{-1}(1 + q/k)e^{-2iqa} \\ B &= -2D^{-1}(1 - q/k)e^{2iqa} \end{aligned}$$

que l'on réinjecte dans la troisième équation de départ pour avoir  $t$ ,

$$t = \left[ \cos 2qa - \frac{i}{2} \left( \frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \sin 2qa \right]^{-1}.$$

En termes de courants de particules

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \mathbf{u}_x$$

on obtient pour les parties incidente, réfléchie et transmise, les valeurs

$$\begin{aligned} |\mathbf{j}_{\text{inc}}| &= \frac{\hbar k}{m} \\ |\mathbf{j}_{\text{réfl}}| &= -\frac{\hbar k}{m} |r|^2 \\ |\mathbf{j}_{\text{trans}}| &= \frac{\hbar k}{m} |t|^2 \end{aligned}$$

auxquels sont proportionnels les flux de particules (par unité de surface perpendiculaire à  $x$ ). Les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés par

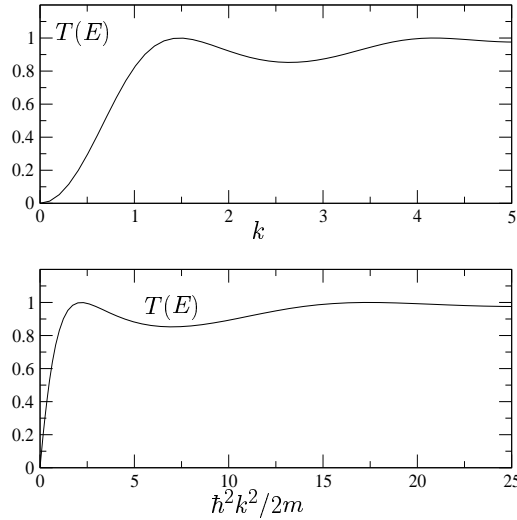
$$\begin{aligned} R &= |r|^2 \\ T &= |t|^2 \\ R + T &= 1 \end{aligned}$$

en particulier pour le puits fini à une dimension,

$$T = \left[ 1 + \left( \frac{q^2 - k^2}{2qk} \right)^2 \sin^2 2qa \right]^{-1}$$

qui s'exprime en fonction de l'énergie des particules incidentes,  $(q^2 - k^2)^2 = (2mV_0/\hbar^2)^2$ ,  $4q^2k^2 = 4(2m/\hbar^2)E(E + V_0)$ , soit

$$T(E) = \left[ 1 + \left( \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \right) \sin^2 (2a\sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}) \right]^{-1}.$$



Le coefficient de transmission varie entre 0 et 1 et vaut 1 lorsque  $\sin 2qa$  s'annule, c'est-à-dire pour  $2qa = n\pi$ , donc aux énergies

$$E_n = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} - V_0 > 0.$$

Ces valeurs correspondent aux états liés du puits infini de même largeur  $2a$  que le puits fini considéré ici. Il y a alors transparence totale du potentiel. Ce phénomène peut sembler étrange, il peut se comprendre en notant qu'à ces énergies, la fonction d'onde (du puits infini de même largeur) s'annule aux deux bords du puits  $x = 0$  et  $x = 2a$  et les particules incidentes à ces énergies ne peuvent donc pas sentir de variation locale de potentiel. Cette transparence est une manifestation simplifiée de l'effet Ramsauer-Townsend.

Le point intéressant dans cet exemple est que la détermination des coefficients de réflexion et de transmission donne des informations indirectes sur la structure du potentiel d'interaction, et permet ainsi en partie de remonter aux caractéristiques de ce dernier par comparaison avec des modèles élaborés a priori et donc de les valider ou au contraire de les rejeter. C'est la démarche qui a été employée classiquement pour valider le modèle de Rutherford et qui depuis est l'outil de base de la détermination des processus d'interaction et de cohésion de la matière, notamment dans le domaine de la physique des particules élémentaires.



# 15

## Définition des sections efficaces

Dans une expérience de diffusion, on envoie des particules incidentes sur une cible. Le flux incident est noté  $J_0$ . La section efficace mesure le nombre de particules défectées dans un angle solide déterminé dans la direction où l'on a virtuellement placé un compteur. On repère cette direction par un vecteur  $\hat{\mathbf{u}}_r$ , dans la direction de diffusion <sup>(30)</sup>, soit encore par les angles  $\theta$  et  $\varphi$  par rapport à la direction du faisceau incident,  $\hat{\mathbf{k}}_{\text{inc}}$  (le vecteur d'onde incident est aussi noté  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{inc}}$ ). Le nombre de particules  $d^3N$  défectées pendant un temps  $dt$  dans la surface élémentaire  $r^2 d^2\Omega$  du compteur (les flux  $J$  sont en nombre de particules par unité de temps et de surface,  $[J] = \text{L}^{-2}\text{T}^{-1}$ ) vaut

$$d^3N = J' \underbrace{r^2 d^2\Omega}_{\text{compteur}} dt$$

et il correspond à ce que préleverait au faisceau incident une cible totalement opaque de surface équivalente  $d^2\sigma$ , soit

$$d^3N = J_0 \underbrace{d^2\sigma}_{\text{cible}} dt = J_0 \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} d^2\Omega dt$$

La section efficace  $d^2\sigma$  se mesure (comme l'indique son nom) en unités de surface <sup>(31)</sup>,  $[\sigma] = \text{L}^2$ . On distingue ensuite plusieurs cas de figure, mais la définition générale

<sup>(30)</sup> On note encore  $\hat{\mathbf{u}}_r = \hat{\mathbf{k}}_{\text{diff}} = \mathbf{k}_{\text{diff}}/|\mathbf{k}_{\text{diff}}| = \mathbf{k}'/|\mathbf{k}'|$ .

<sup>(31)</sup> On prend garde dans ce cours, contrairement à l'usage traditionnel, de noter les dimensions des éléments différentiels, de sorte que la section efficace différentielle souvent notée  $d\sigma/d\Omega$  est ici  $d^2\sigma/d^2\Omega$ .

provient de l'égalité des deux expressions,

$$d^3N = J' \underbrace{r^2 d^2\Omega}_{\text{compteur}} dt = J_0 \underbrace{d^2\sigma}_{\text{cible}} dt.$$

- i) Lorsque le faisceau incident est constitué de particules (diffusion de Rutherford par exemple), on a  $d^2\sigma = b d\alpha db$  où  $\alpha$  mesure l'angle de rotation autour du faisceau incident, et coïncide donc avec  $\varphi$  du côté diffusé. On a alors  $d^3N = J_0 b d\alpha db dt = J_0 \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} d^2\Omega dt$  avec  $d^2\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ , soit

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|.$$

- ii) Si le faisceau incident est une onde électromagnétique classique, les rapports de flux diffusé et incident sont dans les rapports des modules au carré des champs électriques (ou les rapports des intensités) associés à l'onde,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{J'}{J_0} r^2 = \frac{|\mathbf{E}'|^2}{|\mathbf{E}_0|^2} r^2.$$

- iii) Lorsque l'on effectue un traitement quantique, on applique également cette dernière expression. La fonction d'onde représentant le faisceau incident est une onde plane,

$$\psi_0(\mathbf{r}) = A_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = A_0 e^{i|\mathbf{k}|z}.$$

On écrit que l'onde diffusée est asymptotiquement sphérique (dans les conditions d'une expérience, le compteur est placé à distance macroscopique alors que les interactions faisceau incident-cible sont limitées à des échelles microscopiques. On a donc

$$\psi'(\mathbf{r}) = A'(\Omega) \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{r}.$$

Les flux incident et diffusé sont donc donnés par

$$J_0 = \frac{\hbar|\mathbf{k}|}{m} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 = \frac{\hbar|\mathbf{k}|}{m} |A_0|^2$$

$$J' = \frac{\hbar|\mathbf{k}'|}{m} |\psi'(\mathbf{r})|^2 = \frac{\hbar|\mathbf{k}'|}{m} \frac{|A'(\Omega)|^2}{r^2}$$

On en déduit

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \frac{|A'(\Omega)|^2}{|A_0|^2 r^2} r^2 = \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \frac{|A'(\Omega)|^2}{|A_0|^2}.$$

On simplifie en général en considérant une onde incidente normée,  $A_0 = 1$ ,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} |A'(\Omega)|^2 = \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \left| \frac{d^2f}{d^2\Omega} \right|^2,$$

où  $A'(\Omega) = \frac{d^2f}{d^2\Omega}$  est l'amplitude de diffusion, homogène à une longueur.

La quantité  $\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}$  est appelée section efficace différentielle. Par intégration sur l'angle solide, elle conduit à la section efficace totale

$$\sigma = \int \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} d^2\Omega.$$



# 16

## Sections efficaces et règle d'or

### Relation générale entre section efficace et taux de transition élémentaire

Une façon très féconde également de calculer les sections efficaces repose sur la règle d'or de Fermi. On simplifie ici le problème en considérant un faisceau monochromatique incident ( $\mathbf{k}$  bien défini) et une cible limitée à un seul atome dans un état discret (l'état fondamental par exemple). On peut polariser le faisceau incident <sup>(32)</sup> et analyser également la polarisation diffusée si besoin. Il s'agit d'une expérience de diffusion, l'état total du système est donc constitué d'une partie faisceau (dans le continuum) et d'une partie atomique (on supposera ici dans un premier temps qu'il n'y a que des transitions entre états discrets pour l'atome), de sorte qu'on a bien des transitions entre états du continuum de par la partie faisceau, ce qui autorise l'utilisation de la règle d'or. Dans la règle d'or il apparaît la densité d'états dans l'état final qu'il faut maintenant préciser proprement. En général, le système est supposé se trouver dans une boîte cubique de taille  $L^3$ . Le nombre total d'états dans l'état final (quantités primées) est donné par

$$\begin{aligned} n' &= \sum_{\varepsilon'} \int dE' \int d^2\Omega \frac{d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'}}{dE' d^2\Omega} \\ &= \sum_{\varepsilon'} \int dE' \rho_{\varepsilon'}(E') \end{aligned}$$

---

<sup>(32)</sup> On note  $\varepsilon$  ou  $\sigma$  la polarisation selon qu'il s'agit de photons ou de particules massives ayant un spin, le contexte suffit à éviter toute confusion avec la section efficace.

$$\text{densité d'états en énergie } \rho_{\varepsilon'}(E') = \int d^2\Omega \frac{d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'}}{dE' d^2\Omega},$$

$$\text{densité d'états partielle } \frac{d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'}}{dE' d^2\Omega} = \frac{d^2 \rho_{\varepsilon'}(E')}{d^2\Omega}.$$

Dans ces relations,  $\varepsilon'$  représente la polarisation du faisceau dans l'état final. Si l'on ne s'intéresse pas à l'angle de diffusion, on peut utiliser le nombre d'états d'énergie  $E'$  à  $dE'$  près,  $dn_{\mathbf{k}'\varepsilon'} = \rho_{\varepsilon'}(E') dE'$ , mais il faut s'assurer que les éléments de matrice n'ont pas de dépendance angulaire.

Le taux de transition est mesuré par unité de temps et d'angle solide,

$$\frac{d^2\Gamma}{d^2\Omega} = \frac{d^3N}{d^2\Omega dt}.$$

Comme la section efficace est de la même forme que le taux de transition,  $J_0 \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{d^3N}{d^2\Omega dt}$ , on a une relation de proportionnalité

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = J_0^{-1} \frac{d^2\Gamma}{d^2\Omega}$$

où  $J_0$  est toujours le flux incident.

On en déduit une relation très importante en raison de ses nombreuses applications pratiques,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = J_0^{-1} \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \frac{d^2 \rho_{\varepsilon'}(E_f)}{d^2\Omega}, \quad (16.1)$$

assortie d'une condition de conservation de l'énergie dont la forme précise dépend du processus impliqué. Ici, la densité d'états en sortie est résolue en angle, soit

$$\frac{d^2 \rho_{\varepsilon'}(E')}{d^2\Omega} = \frac{d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'}}{dE' d^2\Omega}.$$

Pour déterminer cette densité d'états dans l'état final par unité d'angle solide, on écrit que dans un volume  $L^3$ , le nombre d'états de polarisation  $\varepsilon'$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$  vaut

$$\begin{aligned} d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'} &= \frac{d^2 \rho_{\varepsilon'}(E')}{d^2\Omega} d^2\Omega dE' \\ &= \frac{d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'}}{d^2\Omega dE'} d^2\Omega dE' \\ &= \underbrace{|\mathbf{k}'|^2 d|\mathbf{k}'|}_{\text{volume disponible}} d^2\Omega \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3}_{\text{volume d'un mode}} \end{aligned}$$

On utilise ensuite la relation de dispersion adaptée au problème considéré.

On peut donc distinguer plusieurs cas, à la fois pour le faisceau incident, puisque la forme prise par le flux  $J_0$  en dépend, mais aussi pour la densité d'état qui dépend de la nature des particules diffusées et ne prend pas la même forme selon qu'il s'agit de particules massives (électrons ou neutrons par exemple) ou non massives (photons) à cause des relations de dispersion différentes.

### Flux incident

Dans le cas d'un faisceau incident de photons, on suppose pour simplifier qu'il s'agit d'un faisceau incident dans un mode bien particulier, soit  $n_{\mathbf{k}\varepsilon}$  le nombre de photons dans ce mode  $|\mathbf{k}\varepsilon\rangle$  (dont on précisera le sens ultérieurement) dans un volume  $L^3$ . Le nombre d'interactions effectives dans la surface efficace  $d^2\sigma$  en  $dt$  est donné par le nombre de photons dans le volume  $c dt d^2\sigma$ , soit  $d^3N_0 = c dt d^2\sigma (n_{\mathbf{k}\varepsilon} L^{-3}) = J_0 dt d^2\sigma$ , soit

$$J_0 = n_{\mathbf{k}\varepsilon} L^{-3} c. \quad (16.2)$$

Les particules massives sont en général représentées par une onde plane normée dans le volume  $L^3$ ,  $\psi_0(\mathbf{r}) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , soit un flux incident

$$J_0 = \frac{\hbar |\mathbf{k}|}{m} L^{-3}. \quad (16.3)$$

### Densité d'état des photons

Pour déterminer la densité d'états dans l'état final par unité d'angle solide, on applique la relation donnant le nombre de modes dans un volume élémentaire dans l'espace réciproque,

$$d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'} = \frac{d^2 \rho_{\varepsilon'}(E')}{d^2 \Omega} d^2 \Omega dE' = |\mathbf{k}'|^2 d|\mathbf{k}'| d^2 \Omega \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3$$

En utilisant de plus la relation de dispersion  $E' = |\mathbf{p}'|c = \hbar |\mathbf{k}'|c$ , soit  $d|\mathbf{k}'| = dE'/\hbar c$ , on a

$$d^3 n_{\mathbf{k}'\varepsilon'} = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{E'^2}{(\hbar c)^3} dE' d^2 \Omega$$

soit

$$\frac{d^2 \rho(E')}{d^2 \Omega} = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{E'^2}{(\hbar c)^3} = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}'}^2}{\hbar c^3} \quad (16.4)$$

où l'on a introduit la pulsation  $\omega_{\mathbf{k}'}$  de l'onde diffusée,  $E' = \hbar \omega_{\mathbf{k}'}$ .

### Densité d'état pour des particules massives

Pour des particules massives en sortie on procède exactement de la même manière. Dans un volume  $L^3$ , le nombre d'états de polarisation  $\sigma'$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$  vaut

$$d^3 n_{\mathbf{k}'\sigma'} = \frac{d^2 \rho_{\sigma'}(E')}{d^2 \Omega} d^2 \Omega dE' = |\mathbf{k}'|^2 d|\mathbf{k}'| d^2 \Omega \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3$$

En utilisant cette fois la relation de dispersion parabolique,  $E' = \frac{|\mathbf{p}'|^2}{2m} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2}{2m}$ , on obtient

$$d^3 n_{\mathbf{k}'\sigma'} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m}{\hbar^2} |\mathbf{k}'| dE' d^2\Omega$$

soit

$$\frac{d^2 \rho_{\sigma'}(E')}{d^2\Omega} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m}{\hbar^2} |\mathbf{k}'| = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2E'} \quad (16.5)$$

où l'on travaille soit en vecteur d'onde, soit en énergie.

### Bilan

Pour un problème de diffusions de lumière (photons en entrée et en sortie), la section efficace différentielle est donc donnée par

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \underbrace{\frac{L^3}{n_{\mathbf{k}\varepsilon} c}}_{\text{faisceau incident}} \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}'}^2}{\hbar c^3}}_{\text{faisceau diffusé}}. \quad (16.6)$$

Pour un problème de diffusion élastique d'électrons (si la diffusion est bien élastique, on retrouve des électrons en sortie), la section efficace vaut

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \underbrace{\frac{mL^3}{\hbar |\mathbf{k}|}}_{\text{faisceau incident}} \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2E'}}_{\text{faisceau diffusé}}. \quad (16.7)$$

On peut également avoir un problème du type photo-émission, où des photons incidents éjectent des électrons de la cible, on a alors

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \underbrace{\frac{L^3}{n_{\mathbf{k}\varepsilon} c}}_{\text{faisceau incident}} \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{2E'}}_{\text{faisceau diffusé}}. \quad (16.8)$$

On multiplie par deux ces résultats si le détecteur n'est pas sélectif en polarisation (ou en spin).

**17****Equation intégrale de la diffusion**

On se propose d'établir l'équation de Lippmann-Schwinger, qui résoud, en principe, le problème de la diffusion d'une particule par un potentiel arbitraire.

**Fonctions de Green en électromagnétisme**

Une digression utile consiste à revenir au problème du potentiel en électrostatique. Soit à résoudre l'équation de Poisson

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r})/\varepsilon_0.$$

Lorsque  $\rho(\mathbf{r})$  est limité à un volume d'extension finie, la solution générale est de la forme

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Cette solution, qui apparaît comme une somme de contributions coulombiennes élémentaires, sommées sur tout le volume chargé, est en fait obtenue à partir de la fonction de Green associée à l'équation de Poisson. Soit  $G(\mathbf{r})$  la solution de l'équation sans second membre,

$$\Delta G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}).$$

Elle correspond au potentiel coulombien d'une charge ponctuelle  $-\varepsilon_0$ ,

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r}|},$$

et l'équation de Poisson étant linéaire, il suffit de décomposer la source  $\rho(\mathbf{r})$  sur des charges unité,

$$-\rho(\mathbf{r})/\varepsilon_0 = -\varepsilon_0^{-1} \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}')$$

pour sommer ensuite les réponses aux charges unité pondérées par la fonction de Green,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= -\varepsilon_0^{-1} \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned}$$

### Equation de Lippmann-Schwinger

On s'intéresse maintenant à un problème de diffusion. A l'énergie  $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}$  (état de diffusion), on compare l'équation de Schrödinger en présence du potentiel décrivant l'interaction avec la cible,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

à l'onde plane  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  de même énergie, solution de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

avec  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . On a donc deux équations

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla}^2 + |\mathbf{k}|^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ (\vec{\nabla}^2 + |\mathbf{k}|^2) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= 0 \end{aligned}$$

soit, par différence

$$(\vec{\nabla}^2 + |\mathbf{k}|^2) [\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = u(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

équation dont on cherche la solution  $[\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})]$ . On décompose la source sur la base des  $\delta(\mathbf{r})$ ,

$$u(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'),$$

ce qui permet de décomposer sur la fonction de Green avec la même fonction poids la solution cherchée,

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \\ (\vec{\nabla}^2 + |\mathbf{k}|^2) G(\mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

La fonction de Green est solution, en symétrie sphérique pour  $r \neq 0$ , de

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rG(r)) + k^2 G(r) = 0$$

que l'on résoud en posant  $\rho = kr$ ,  $d\rho = k dr$ ,

$$\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho G(\rho)) + \rho G(\rho) = 0$$

dont les solutions sont harmoniques  $\rho G(\rho) = A_+ e^{i\rho} + A_- e^{-i\rho}$ , soit

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} (A_+ e^{ikr} + A_- e^{-ikr}).$$

On ne retient physiquement pour le problème de la diffusion que la solution ayant la structure d'une onde sphérique sortante, en  $\frac{e^{ikr}}{r}$ . Par ailleurs la constante s'obtient par intégration de l'équation de définition de la fonction de Green sur une sphère de rayon  $R$  et en faisant tendre  $R$  vers 0,

$$\lim_{R \rightarrow 0} \int_{R^3} d^3r (\vec{\nabla}^2 + k^2) G(\mathbf{r}) = \lim_{R \rightarrow 0} \int_{R^3} \delta(\mathbf{r}) = 1,$$

où le premier membre se développe en

$$\lim_{R \rightarrow 0} \underbrace{\int_{R^3} d^3r \operatorname{div}(\vec{\nabla} G)}_{\text{flux de } \vec{\nabla} G} + k^2 \frac{A_+}{k} \lim_{R \rightarrow 0} \underbrace{\int_0^R \frac{e^{ikr}}{r} 4\pi r^2 dr}_{\text{nul quand } R \rightarrow 0}$$

Avec  $|\vec{\nabla} G| = \frac{A_+}{k} \left( -\frac{e^{ikr}}{r} + ik \frac{e^{ikr}}{r} \right)$ , on obtient

$$\text{flux de } \vec{\nabla} G = \underbrace{-\frac{4\pi A_+}{k} e^{ikR} + \frac{4\pi A_+}{k} ik R e^{ikR}}_{\rightarrow -4\pi A_+ / k \text{ quand } R \rightarrow 0}.$$

On a finalement  $A_+ = -\frac{k}{4\pi}$  et

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}.$$

La solution cherchée du problème de diffusion s'écrit ainsi comme une équation intégrale, connue sous le nom d'équation intégrale de la diffusion ou de forme intégrale de l'équation de Lippmann-Schwinger,

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' u(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \\ &= \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \end{aligned}$$

= soln gnrale éqn sans 2nd mb + soln prtclière éqn complète.

C'est une équation intégrale dans laquelle la solution cherchée apparaît aussi sous l'intégrale au second membre. Elle se résoud de manière itérative par approximations successives.

**100**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*



# 18

## Approximation de Born

### Comportement asymptotique de l'amplitude de diffusion

Un détecteur est placé à grande distance de la cible dans la direction  $\mathbf{k}'$  par rapport à la direction  $\mathbf{k}$  du faisceau incident. L'origine est choisie au niveau de la cible,  $\mathbf{r}'$  décrit la cible et  $\mathbf{r}$  repère le détecteur. On peut faire l'approximation  $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ ,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq |\mathbf{r}| - \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ , on a donc  $k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq kr - k(\mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{r}})$ . Dans le cas de la diffusion élastique, on a encore  $\mathbf{k}' = k \hat{\mathbf{r}}'$  et au dénominateur on se limite<sup>(33)</sup>  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r$ , ce qui donne

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}$$

Cela simplifie l'équation intégrale,

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \\ &= \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + A'(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}, \end{aligned}$$

ce qui permet de définir l'amplitude de diffusion et la section efficace différentielle

$$A'(\Omega) = \frac{d^2 f_{\mathbf{k}}}{d^2 \Omega} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}$$

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} = \left| \frac{d^2 f_{\mathbf{k}}}{d^2 \Omega} \right|^2$$

<sup>(33)</sup> Il faut pousser le développement au premier ordre dans l'argument de l'exponentielle, puisque la différence  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  est comparée à la longueur d'onde dans  $k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ , alors qu'au dénominateur on peut se contenter d'un calcul à l'ordre zéro.

**Série de Born et approximation de Born**

L'approximation de Born consiste à itérer la relation précédente en remplaçant l'intégrale sur  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$  par une intégrale sur  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$  pour faire apparaître la série de Born. Pour cela, on effectue les substitutions de variable d'intégration,  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}''$  et  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ , etc...

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}}{r'} \int d^3r'' U(\mathbf{r}'') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}''},$$

soit en substituant,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}$$

$$\times \left( \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}}{r'} \int d^3r'' U(\mathbf{r}'') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}''} \right).$$

C'est une expression exacte qui conduit à l'approximation jusqu'au second ordre si l'on remplace de nouveau  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'')$  par  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'')$  dans la dernière intégrale,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$- \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}$$

$$+ \left( -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int d^3r' \int d^3r'' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}''}}{r''} U(\mathbf{r}'') e^{-i\mathbf{k}''\mathbf{r}''} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'')$$

La première approximation de Born consiste à s'arrêter au terme d'ordre 1, soit, en utilisant aussi l'onde plane incidente  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  et en définissant le vecteur de diffusion qui mesure le transfert d'impulsion,

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k},$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}'}$$

$$A'(\Omega) = \frac{d^2 f_{\mathbf{k}}}{d^2 \Omega} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q})$$

où l'on a défini la transformée de Fourier tridimensionnelle du potentiel d'interaction,

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \int d^3r' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}$$

Dans le cas d'un potentiel d'interaction à symétrie sphérique,  $U(r)$ , il est utile d'effectuer l'intégration sur les angles dans la transformée de Fourier,

$$\begin{aligned}\tilde{U}(\mathbf{q}) &= \int_0^\infty \underbrace{\int_0^\pi 2\pi \sin \theta' d\theta' r'^2 dr' U(r') e^{-i|\mathbf{q}|r' \cos \theta'}}_{2\pi \int_{-i|\mathbf{q}|r'}^{i|\mathbf{q}|r'} \frac{du}{i|\mathbf{q}|r'} e^u = \frac{4\pi}{|\mathbf{q}|r'} \sin |\mathbf{q}|r'} \\ &= \frac{4\pi}{|\mathbf{q}|} \int_0^\infty dr' r' U(r') \sin |\mathbf{q}|r' .\end{aligned}$$

### Conditions de validité de l'approximation de Born

La première approximation de Born consiste à remplacer  $\psi_{\mathbf{k}}$  par  $\varphi_{\mathbf{k}}$  dans l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger. Il faut pour que ce soit licite que l'onde incidente soit peu distordue dans la région où règne le potentiel. On peut définir un nombre complexe qui mesure cette distorsion,

$$c(\mathbf{k}) = \frac{\psi_{\mathbf{k}}(0) - \varphi_{\mathbf{k}}(0)}{\varphi_{\mathbf{k}}(0)},$$

et la contrainte  $|c(\mathbf{k})| \ll 1$  nous assure de la validité de l'approximation de Born à l'énergie  $E_{\mathbf{k}}$ . Pour estimer  $c(\mathbf{k})$  il faut revenir à l'équation intégrale exacte, car on s'intéresse à la limite  $r \rightarrow 0$  qui n'est pas accessible par la forme asymptotique. Soit

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int d^3r' u(\mathbf{r}') \underbrace{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')}_{\simeq \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')} \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right)$$

dans laquelle on fait  $r = 0$ ,

$$c(\mathbf{k}) \simeq \int d^3r' u(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr'}}{r'} \right).$$

On exige en général que l'approximation de Born soit valable même à la limite  $k \rightarrow 0$ , ce qui représente le cas le plus contraignant, et dans le cas d'un potentiel à symétrie sphérique on impose

$$\begin{aligned}|c(0)| &= \left| \int_0^\infty r' dr' u(r') \right| \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r' dr' |U(r')| \ll 1.\end{aligned}$$

L'approximation de Born est une approximation de haute énergie, valable lorsque le potentiel d'interaction est faiblement perturbateur.

### Exemples d'application

Considérons comme premier exemple un puits carré attractif de rayon  $a$  et de profondeur  $-V_0 < 0$ . La condition de validité s'exprime par  $|c(0)| = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2} V_0 a^2 \ll 1$ .

Il faut donc imposer la contrainte  $V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$ . Pour l'interpréter, on rappelle qu'un confinement dans une région d'extension spatiale  $a$  conduit à une énergie cinétique de l'ordre de  $T = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ . La condition de validité de l'approximation de Born s'écrit donc  $|V_0| \ll T$ , ce qui signifie que le potentiel d'interaction est trop faible pour pouvoir lier un état du faisceau incident. On peut donc procéder au calcul de la transformée de Fourier du potentiel,

$$\begin{aligned}\tilde{U}(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi}{|\mathbf{q}|} \int_0^\infty dr' r' U(r') \sin |\mathbf{q}| r' \\ &= \frac{4\pi V_0}{q} \underbrace{\int_0^a r \sin qr \, dr}_{\frac{\sin qa}{q^2} - \frac{a \cos qa}{q}}.\end{aligned}$$

Finalement,

$$A'(\Omega) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^2} \left( a \cos qa - \frac{\sin qa}{q} \right).$$

On a bien  $[A'(\Omega)] = \text{L}$ .

Un deuxième exemple est fourni par le potentiel gaussien attractif

$$U(r) = -V_0 e^{-(r/a)^2}$$

pour lequel la condition de validité s'exprime par  $|c(0)| = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-(r/a)^2} dr = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2} V_0 a^2 \ll 1$ . C'est la même contrainte que dans l'exemple précédent, ce qui est logique car l'échelle d'énergie est de nouveau fixée par  $V_0$  et celle des longueurs par  $a$ . La transformée de Fourier est donnée par

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q} V_0 \int_0^\infty dr r e^{-r^2/a^2} \sin qr.$$

L'intégrale vaut  $\int_0^\infty r e^{-r^2/a^2} \frac{1}{2i} (e^{iqr} - e^{-iqr}) dr$ , or

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r e^{-r^2/a^2} e^{iqr} dr &= -i \frac{d}{dq} \int_0^\infty e^{iqr - r^2/a^2} dr \\ &= -i \frac{d}{dq} \int_0^\infty e^{-q^2 a^2/4} e^{-(r/a - iqa/2)^2} dr \\ &= -i \frac{d}{dq} e^{-q^2 a^2/4} a \underbrace{\int_0^\infty e^{-u^2} du}_{\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} \\ &= +i \frac{qa^3}{4} \sqrt{\pi} e^{-q^2 a^2/4}.\end{aligned}$$

Finalement on obtient

$$\begin{aligned}\tilde{U}(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi V_0 q a^3}{q} \sqrt{\pi} e^{-q^2 a^2/4} \\ A'(\Omega) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \pi^{3/2} V_0 a^3 e^{-q^2 a^2/4} \\ \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} &= \left(\frac{m a^2 V_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{\pi a^2}{4} e^{-q^2 a^2/2}.\end{aligned}$$

### Diffusion de Rutherford par l'approximation de Born

Le problème de la diffusion de Rutherford est celui du potentiel coulombien. C'est le potentiel d'interaction pertinent lorsque des particules chargées sont envoyées sur des atomes avec un paramètre d'impact typiquement inférieur au rayon de Bohr  $a_0$ , de sorte que l'effet des électrons de l'atome est négligeable. On a donc un potentiel perturbateur

$$U(r) = \frac{2Ze^2}{r}$$

dans les conditions de l'expérience historique au cours de laquelle les projectiles étaient des particules alpha.

La transformée de Fourier tridimensionnelle du potentiel coulombien n'est pas définie, on utilise donc un potentiel décroissant plus rapidement, comme le potentiel de Yukawa,

$$\begin{aligned}U_\mu(r) &= \frac{2Ze^2}{r} e^{-\mu r}, \quad \mu > 0, \\ \tilde{U}_\mu(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi}{q} 2Ze^2 \int_0^\infty dr \sin qr e^{-\mu r} \\ &= \frac{4\pi}{q} 2Ze^2 \frac{1}{2i} \left( \left[ \frac{1}{iq - \mu} e^{(iq - \mu)r} \right]_0^\infty + \left[ \frac{1}{iq + \mu} e^{-(iq + \mu)r} \right]_0^\infty \right) \\ &= \frac{4\pi}{q} 2Ze^2 \frac{1}{2i} \frac{2iq}{\mu^2 + q^2} \\ &= \frac{4\pi}{q} 2Ze^2 \frac{q}{\mu^2 + q^2}\end{aligned}$$

Dans la limite  $\mu \rightarrow 0$ , on obtient le résultat simple suivant,

$$\tilde{U}_0(\mathbf{q}) = 4\pi \frac{2Ze^2}{q^2},$$

d'où l'on déduit la section efficace différentielle de Rutherford,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \left(\frac{4Z}{a_0}\right)^2 q^{-4},$$

qui s'exprime de la manière habituelle en notant que  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ ,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{2E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Il est remarquable d'obtenir la même expression que dans le cas classique.

# 19

## Règle d'or de Fermi et approximation de Born

Nous avons établi la règle d'or de Fermi qui permet d'évaluer l'amplitude de transition entre états quantiques. On peut utiliser cette approche pour démontrer l'approximation de Born comme transition entre un état incident libre représenté par une onde plane et un état final de diffusion asymptotiquement libre également. Cette démonstration est instructive et permet d'établir un lien entre deux approches perturbatives.

On utilise la relation entre taux de transition et section efficace différentielle,

$$\frac{d^2\Gamma}{d^2\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \left( \frac{d^3n}{dE d^2\Omega} \right)_{E_f} = J_0 \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}.$$

Ici,  $U_{fi} = \langle f|U(\mathbf{r})|i\rangle$ , avec  $|i\rangle = |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ ,  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = L^{-3/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  et  $|f\rangle = |\psi_{\mathbf{k}'}\rangle \simeq |\varphi_{\mathbf{k}'}\rangle$  est une onde plane se propageant dans la direction  $\mathbf{k}'$ ,  $\varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\varphi_{\mathbf{k}'}\rangle = L^{-3/2}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ . En représentation de position, le potentiel d'interaction s'écrit

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= \int d^3r |\mathbf{r}\rangle U(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r}| \\ U_{fi} &= \int d^3r \langle \varphi_{\mathbf{k}'}|\mathbf{r}\rangle U(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \\ &= L^{-3} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \\ &= L^{-3} \tilde{U}(\mathbf{q}), \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \end{aligned}$$

Le flux incident vaut  $J_0 = |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 \frac{\hbar k}{m} = L^{-3} \frac{\hbar k}{m}$ . On obtient alors

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} = \frac{m}{\hbar k} L^3 \frac{2\pi}{\hbar} L^{-6} |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2 \left( \frac{d^3 n}{dE d^2 \Omega} \right)_{E_f}.$$

Le nombre d'états dans  $d^3 k$  est donné par

$$\begin{aligned} \frac{d^3 n}{dE d^2 \Omega} dE d^2 \Omega &= \frac{k^2 dk d^2 \Omega}{(2\pi/L)^3}, \\ \left( \frac{d^3 n}{dE d^2 \Omega} \right)_{E_f} &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{mk'}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

En combinant l'ensemble de ces résultats, on obtient finalement

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} = \left( \frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |\tilde{U}(\mathbf{q})|^2,$$

ce qui est bien le résultat dans l'approximation de Born.



## 20

# Méthode des ondes partielles

La méthode des déphasages convient pour traiter les potentiels fortement perturbateurs à symétrie sphérique. Elle est fondée sur un développement de la fonction d'onde sur la base des harmoniques sphériques.

### Fonctions de Bessel et de Neumann sphériques

Les solutions de l'équation de Schrödinger en potentiel nul sont les fonctions de Bessel et de Neumann sphériques (pour la partie radiale). On a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) + \frac{L^2}{2mr^2} \psi = E\psi$$

où l'on pose  $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$  et  $R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\chi_{nl}(r)$ , soit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \chi = E\chi.$$

On pose  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , on obtient alors

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \chi &= k^2 \chi \\ -\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \chi &= \chi \end{aligned}$$

où la deuxième équation ne fait intervenir que des quantités sans dimensions (sauf  $\chi$ ), avec  $\rho = kr$ . On factorise ensuite l'opérateur

$$O_l = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}$$

au moyen des deux opérateurs différentiels du premier ordre, adjoints l'un de l'autre <sup>(34)</sup>

$$\begin{aligned} b_l^+ &= -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \\ b_l &= \frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \\ O_l &= b_l^+ b_l = b_{l+1} b_{l+1}^+ \end{aligned}$$

On en déduit en particulier que si  $\chi_l$  est une solution connue, c'est-à-dire telle que  $O_l \chi_l = \chi_l$ , alors on a aussi  $O_{l+1} b_{l+1}^+ \chi_l = b_{l+1}^+ \chi_l$ , ce qui signifie que  $b_{l+1}^+ \chi_l$  est une nouvelle solution du problème, associée à une valeur augmentée du moment cinétique et que l'on peut par conséquent noter  $\chi_{l+1}$  (à un facteur de normation près dont on ne se préoccupe pas ici). Si l'on trouve la solution correspondant à  $l = 0$ , on engendre les autres solutions par applications successives de l'opérateur échelle, comme dans le problème de l'oscillateur harmonique. Soit donc à résoudre l'équation

$$\frac{d^2 \chi_0}{d\rho^2} + \chi_0 = 0, \quad \text{d'où} \quad \chi_0(\rho) = \begin{cases} \sin \rho \\ -\cos \rho \end{cases}$$

Le choix de signe est conventionnel. En revenant à la partie radiale de la fonction d'onde on a

$$R_0(\rho) = A_0 \frac{\sin \rho}{\rho} - B_0 \frac{\cos \rho}{\rho} = A_0 j_0(\rho) + B_0 n_0(\rho)$$

ce qui définit les fonctions de Bessel et de Neumann sphériques d'ordre 0. On génère ensuite  $R_1(\rho) = A_0 j_1(\rho) + B_0 n_1(\rho)$  par les relations

$$\begin{aligned} j_1(\rho) &= \frac{1}{\rho} \left( -\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho} \right) (\rho j_0(\rho)) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \\ n_1(\rho) &= \frac{1}{\rho} \left( -\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho} \right) (\rho n_0(\rho)) = -\frac{\sin \rho}{\rho} - \frac{\cos \rho}{\rho^2} \end{aligned}$$

---

<sup>(34)</sup>

$$\begin{aligned} \langle \chi_1 | b_l^+ | \chi_2 \rangle^* &= \left[ \int_0^\infty d\rho \chi_1^*(\rho) \left( -\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right) \chi_2(\rho) \right]^* \\ &= \int_0^\infty d\rho \chi_1(\rho) \frac{l}{\rho} \chi_2^*(\rho) - \underbrace{\int_0^\infty d\rho \chi_1(\rho) \frac{d}{d\rho} \chi_2^*(\rho)}_{[\chi_1(\rho) \chi_2^*(\rho)]_0^\infty - \int_0^\infty d\rho \chi_2^*(\rho) \frac{d\chi_1}{d\rho}} \\ &= \int_0^\infty d\rho \chi_2^*(\rho) \left( \frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right) \chi_1(\rho) = \langle \chi_2 | b_l | \chi_1 \rangle \end{aligned}$$

puis les autres par itérations successives. Les fonctions de Bessel sphériques sont régulières à l'origine alors que les fonctions de Neumann sphériques sont singulières. On définit de même des combinaisons complexes, les fonctions de Hankel sphériques,

$$h_l^\pm(\rho) = j_l(\rho) \pm in_l(\rho).$$

Les deux premières par exemple sont données par

$$h_0^\pm(\rho) = \mp \frac{i}{\rho} e^{\pm i\rho},$$

$$h_1^\pm(\rho) = -\frac{1}{\rho} \left( 1 \pm \frac{i}{\rho} \right) e^{\pm i\rho}.$$

Certains comportements asymptotiques sont fort utiles, on en donne quelques-uns dans le tableau ci-dessous.

**Tableau 20.1** Comportements asymptotiques des fonctions de Bessel, de Neumann et de Hankel sphériques ((2l + 1)!! est le produit des entiers impairs).

| fonction | $r \rightarrow \infty$   | $r \rightarrow 0$  |
|----------|--|--|
| Bessel   | $j_\ell(\rho) \rightarrow \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \ell\pi/2)$       | $j_\ell(\rho) \sim \frac{\rho^\ell}{(2\ell + 1)!!}$        |
| Neumann  | $n_\ell(\rho) \rightarrow -\frac{1}{\rho} \cos(\rho - \ell\pi/2)$      | $n_\ell(\rho) \sim -(2\ell - 1)!! \frac{1}{\rho^{\ell+1}}$ |
| Hankel   | $h_\ell^-(\rho) \rightarrow i \frac{1}{\rho} e^{-i(\rho - \ell\pi/2)}$ |  |
| Hankel   | $h_\ell^+(\rho) \rightarrow -i \frac{1}{\rho} e^{i(\rho - \ell\pi/2)}$ |  |

### Développement de l'onde plane en harmoniques sphériques

Pour une particule libre,  $V(\mathbf{r}) = 0$ , la partie angulaire de la solution de l'équation  $(\vec{\nabla}^2 + k^2)\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$  se développe donc sur la base des harmoniques sphériques et la partie radiale est donnée par une combinaison de fonctions de Bessel et de Neumann sphériques :

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (a_{lm} j_l(kr) + b_{lm} n_l(kr)) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Comme la fonction  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta}$  est régulière à l'origine, les  $b_{lm}$  sont tous nuls et comme  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta}$  ne dépend pas de  $\varphi$ , on sélectionne  $m = 0$ , c'est-à-dire à une constante près les polynômes de Legendre,

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta).$$

La détermination des constantes  $A_l$  se fait par projection sur la base des polynômes de Legendre,

$$\int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} \cos \theta} P_{l'}(\cos \theta) = \sum_l A_l j_l(kr) \frac{2}{2l + 1} \delta_{l,l'}.$$

Le premier membre est intégré par parties pour donner

$$\underbrace{\left[ -\frac{1}{ikr} e^{ikr \cos \theta} P_{l'}(\cos \theta) \right]_0^\pi}_{\frac{1}{ikr} (e^{ikr} - (-1)^{l'} e^{-ikr})} - \frac{1}{ikr} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta e^{ikr \cos \theta} \frac{dP_{l'}(\cos \theta)}{d \cos \theta}$$

En factorisant  $(-1)^{l'/2} = e^{i\pi l'/2}$ , le premier terme devient  $\frac{1}{ikr} e^{i\pi l'/2} 2i \sin(kr - l'\pi/2)$ . Quant au second, si l'on réitère l'intégration par parties, on obtient un terme en  $\frac{1}{(ikr)^2}$  qui, comme on va le voir, n'intervient pas dans la suite. On utilise ensuite l'expression asymptotique de  $j_l(kr) \sim (kr)^{-1} \sin(kr - l\pi/2)$ , de sorte que l'expression précédente, dans la limite  $r \rightarrow \infty$ , permet d'identifier

$$A_{l'}(2l' + 1) = e^{i l' \pi / 2},$$

et on obtient finalement le développement de Rayleigh de l'onde plane en harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sum_l (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \\ &= \sum_l \frac{1}{2} (2l + 1) i^l (h_l^-(kr) + h_l^+(kr)) P_l(\cos \theta). \end{aligned}$$

### Introduction des déphasages

On considère maintenant le cas d'une particule dans un état de diffusion par un potentiel arbitrairement fort, mais à symétrie sphérique. Cette contrainte de symétrie permet une approche exacte. Supposons pour simplifier le traitement du problème que la portée du potentiel soit finie, c'est-à-dire qu'au-delà d'une distance  $r = a$ , la solution de l'équation de Schrödinger est une onde plane que l'on compare à la particule totalement libre. La solution cherchée est une modification minime du développement de Rayleigh qui doit satisfaire quelques conditions évidentes,

- i) la partie entrante (en  $h_l^-(kr)$ ) de l'onde n'est pas modifiée,
- ii) l'onde sortante n'est pas modifiée en module, donc elle est affectée au plus par un déphasage,
- iii) le déphasage, noté conventionnellement  $2\delta_l$ , dépend de la valeur du moment cinétique  $l$ .

Au total, pour satisfaire ces contraintes, on écrit la solution à l'extérieur de la zone d'action du potentiel sous la forme

$$\psi_{\mathbf{k}}^>(r, \theta) = \sum_l \frac{1}{2} (2l + 1) i^l (h_l^-(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^+(kr)) P_l(\cos \theta).$$

Lorsque  $r \leq a$ , un traitement explicite adapté à la forme exacte du potentiel est nécessaire et en supposant ce traitement faisable, on peut mettre la fonction d'onde sous une forme analogue où seule la partie radiale est à déterminer,

$$\psi_{\mathbf{k}}^<(r, \theta) = \sum_l (2l + 1) i^l R_l(r) P_l(\cos \theta).$$

Les déphasages s'obtiennent explicitement grâce aux conditions de raccordement en  $r = a$ . Comme les polynômes de Legendre sont orthogonaux entre eux, les conditions de continuité se font valeur de  $l$  par valeur de  $l$ , soit

$$\alpha_l = \left( \frac{R'_l(r)}{R_l(r)} \right)_a = \left( \frac{h_l^-(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^+(kr)}{h_l^-(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^+(kr)} \right)_a.$$

Une expression équivalente exprimée en fonction des fonctions de Bessel et de Neumann et de leurs dérivées donne directement la valeur du déphasage,

$$\cot g \delta_l = \left( \frac{n'_l(kr) - \alpha_l n_l(kr)}{j'_l(kr) - \alpha_l j_l(kr)} \right)_a.$$

### Calcul de la section efficace

Le comportement asymptotique de l'onde diffusée est donné par

$$\psi_{\mathbf{k}}^>(r, \theta) \sim e^{ikr \cos \theta} + A_{\mathbf{k}}(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$$

que l'on obtient en prenant la limite  $r \rightarrow \infty$  dans

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^>(r, \theta) &= \sum_l \frac{1}{2} (2l+1) i^l (h_l^-(kr) + h_l^+(kr) - h_l^+(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^+(kr)) P_l(\cos \theta) \\ &= e^{ikr \cos \theta} + \sum_l \frac{1}{2} (2l+1) i^l (e^{2i\delta_l} - 1) h_l^+(kr) P_l(\cos \theta) \\ &\sim e^{ikr \cos \theta} + \frac{1}{ik} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l \frac{1}{2} (2l+1) i^l (e^{2i\delta_l} - 1) e^{-il\pi/2} P_l(\cos \theta) \\ &\sim e^{ikr \cos \theta} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} \sum_l \frac{1}{2} (2l+1) (-i) e^{i\delta_l} 2i \sin \delta_l P_l(\cos \theta), \end{aligned}$$

d'où l'on déduit l'amplitude différentielle de diffusion,

$$A_{\mathbf{k}}(\Omega) = \sum_l A_{\mathbf{k},l}(\Omega) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta).$$

Cela permet le calcul aisé de la section efficace totale

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{k}} &= \int_0^\pi |A_{\mathbf{k}}(\Omega)|^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \underbrace{\int_0^\pi 2\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)}_{\frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,l'}}. \end{aligned}$$

Il vient finalement un résultat très simple dans lequel les différentes valeurs de  $l$  apparaissent comme autant de canaux indépendants les uns des autres,

$$\sigma_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \sin^2 \delta_l.$$

En première approximation, on se limite souvent à la diffusion  $s$  pour laquelle le déphasage  $\delta_0$  est facile à calculer car il n'y a alors aucun potentiel centrifuge dans l'hamiltonien.

### Conditions de convergence des premiers déphasages

L'un des intérêts de la méthode des déphasages, outre le fait qu'elle est exacte, réside dans le fait que les déphasages ont un comportement monotone décroissant qui assure que la série des  $\sigma_l$  converge rapidement lorsque  $l$  augmente. On met en évidence cette propriété par un argument physique. Quelle que soit la valeur de l'énergie  $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , si grande soit-elle, il existe une distance  $r_{min}$  au-dessous de laquelle le potentiel centrifuge  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_{min}^2}$  domine  $E_{\mathbf{k}}$ . Cela signifie qu'à cette énergie <sup>(35)</sup> la particule incidente n'explore pas les régions de l'espace au dessous de  $r_{min} \simeq k^{-1} \sqrt{l(l+1)}$  (classiquement,  $r_{min}$  représente la distance minimale d'approche). Cette valeur dépend évidemment de  $l$ . Si la portée  $a$  du potentiel est plus petite que  $r_{min}$ , le potentiel est sans effet sur la diffusion et l'on doit avoir pour cette valeur de  $l$  et au-delà  $\delta_l \simeq 0$ , comme pour l'onde plane de référence. La même condition s'exprime de manière inverse : pour les valeurs de  $l$  telles que  $l(l+1) \geq (ka)^2$ , on a essentiellement  $\delta_l = 0$ . En particulier lorsque l'énergie de la particule incidente est assez petite pour que  $ka \ll 1$ , la valeur de  $l$  qui satisfait la condition  $l(l+1) \simeq (ka)^2$  est  $[k^2 a^2]$  (partie entière) et on peut en fait se limiter à la diffusion  $s$ ,  $\sigma_{\mathbf{k}} \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0$ .

### Lien avec l'approximation de Born

L'amplitude différentielle de diffusion que nous venons d'écrire de manière exacte sous la forme

$$A_{\mathbf{k}}(\Omega) = \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$

pour un potentiel à symétrie sphérique peut également être décrite par l'approximation de Born si le potentiel est faiblement perturbateur, soit

$$A_{\mathbf{k}}(\Omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{q})$$

avec  $\tilde{V}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r dr V(r) \sin qr$  et  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ . Cette dernière expression peut encore s'écrire sous la forme

$$A_{\mathbf{k}}(\Omega) \simeq \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) \zeta_l P_l(\cos \theta)$$

<sup>(35)</sup> On néglige ici le potentiel perturbateur, mais sa prise en compte ne modifierait que quantitativement le raisonnement.

où les  $\zeta_l$  sont les approximants de Born <sup>(36)</sup> de  $e^{i\delta_l} \sin \delta_l$ . On les détermine en utilisant encore une fois l'orthogonalité des polynômes de Legendre,

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{l'}(\cos \theta) A_{\mathbf{k}}(\Omega) &= \frac{2}{k} \zeta_{l'} \\ &= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{l'}(\cos \theta) \tilde{V}(\mathbf{q}) \\ &= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_{l'}(\cos \theta) \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r dr V(r) \sin qr \end{aligned}$$

soit finalement

$$\zeta_l = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{1}{2} k \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) \frac{4\pi}{2k \sin \theta/2} \int_0^\infty r dr V(r) \sin \left( 2kr \sin \frac{\theta}{2} \right),$$

et cela fait apparaître une structure oscillante dans l'approximation de Born en fonction de l'angle de diffusion,

$$A_{\mathbf{k}}(\Omega) \simeq \frac{1}{k} (\zeta_0 + 3\zeta_1 \cos \theta + \frac{5}{2}\zeta_2(\cos^2 \theta - 1) + \dots).$$

---

<sup>(36)</sup> H.A. Bethe and R. Jackiw, *Intermediate quantum mechanics*, Westview Press, Boulder 1997, p. 250.

**116**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*



## **Interactions photons-atomes**

**118**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

**21****Approche classique de la diffusion élastique de la lumière****Diffusion Thomson par un électron**

Un faisceau lumineux à haute fréquence est envoyé sur des atomes. Le champ électrique de l'onde fait vibrer les électrons qui ré-émettent (champ de la charge accélérée) à la fréquence d'excitation (diffusion élastique). Le rayonnement incident étant à haute énergie, on peut négliger l'énergie de liaison des électrons et les considérer comme libres en première approximation, d'où le modèle de la diffusion par un électron dans un premier temps.

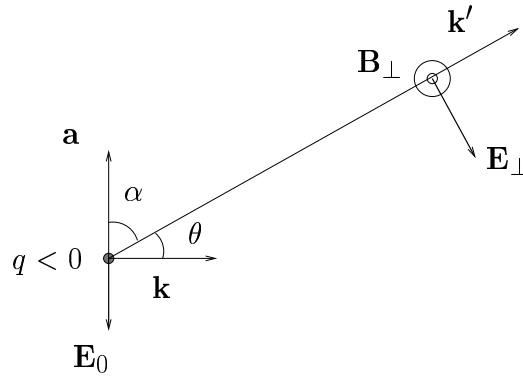
Rappelons que le champ rayonné est transverse par rapport à la direction d'observation et qu'il est polarisé dans le plan  $(\mathbf{a}, \mathbf{k}')$ . La contribution dominante vaut

$$\begin{aligned}
 E_{\perp}(t - r/c) &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_{\perp}(t - r/c)}{rc^2} \\
 B_{\perp}(t - r/c) &= \frac{1}{c} E_{\perp}(t - r/c) \\
 &= \frac{q\mu_0}{4\pi} \frac{a_{\perp}(t - r/c)}{rc^2} \\
 a_{\perp} &= a \sin \alpha = a \cos \theta
 \end{aligned}$$

et le calcul de la puissance élémentaire dissipée à la distance  $r$  dans l'angle solide  $d^2\Omega$  autour de la direction de diffusion  $\mathbf{k}'$  peut se faire au moyen du flux du vecteur

de Poynting :

$$\begin{aligned}\pi_R &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}_R \wedge \mathbf{B}_R \\ &= \varepsilon_0 c^2 |\mathbf{E}_R|^2 \frac{\mathbf{k}}{k} \\ &= \frac{q^2 a^2 \sin^2 \alpha}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \frac{1}{r^2} \frac{\mathbf{k}}{k}.\end{aligned}$$



La puissance élémentaire vaut

$$\begin{aligned}d^2 P_R &= \pi_R d\mathbf{S} = \pi_R r^2 d^2 \Omega \\ \frac{d^2 P_R}{d^2 \Omega} &= \frac{q^2 a^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \sin^2 \alpha.\end{aligned}$$

C'est la puissance émise par stéradian à l'angle  $\alpha$ , ou encore à l'angle  $\theta$  tel que  $\alpha = \pi/2 - \theta$  et  $\theta$  est l'angle de diffusion habituel entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$ .

La puissance dissipée par la charge accélérée est maximale perpendiculairement à la direction de l'accélération. Si la particule est relativiste, les lobes d'émission sont davantage dirigés dans le sens du mouvement et il apparait un terme correctif,

$$\frac{d^2 P_R}{d^2 \Omega} = \frac{q^2 a^2 \sin^2 \alpha}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3 (1 - \beta \cos \alpha)^5}.$$

Pour traiter le problème de la diffusion Thomson (diffusion élastique à haute énergie), on a maintenant  $q = -|q_e|$  et l'angle  $\Theta$  entre la polarisation incidente et la polarisation du rayonnement diffusé (cet angle correspond à l'angle  $\theta$  dans le cas de figure représenté où la polarisation incidente est dans le plan  $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , mais il vaut zéro si l'on se place dans une configuration où la polarisation incidente est orthogonale à ce plan représenté.). Dans le cas général,  $a_\perp$  étant la projection de l'accélération perpendiculairement à  $\mathbf{k}'$ , on a

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= -\frac{|q_e|}{m} \mathbf{E}_0 \\ a_\perp &= \mathbf{a} \cdot \frac{\mathbf{E}_R}{E_R} = -\frac{|q_e|}{m} \frac{\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{E}_R}{E_R} = -\frac{|q_e|}{m} E_0 \cos \Theta,\end{aligned}$$

d'où la valeur de  $E_R = -\frac{|q_e|}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_1}{rc^2}$

$$E_R = \underbrace{\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}}_{r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = \alpha^2 a_0} \frac{1}{r} \frac{E_0 \cos \Theta}{r} = \frac{r_0}{r} E_0 \cos \Theta.$$

Le vecteur de Poynting vaut alors  $|\boldsymbol{\pi}_R| = \epsilon_0 c r_0^2 E_0^2 \cos^2 \Theta / r^2$  et la puissance rayonnée

$$\frac{d^2 P_R}{d^2 \Omega} = |\boldsymbol{\pi}_R| r^2 = \epsilon_0 c r_0^2 E_0^2 \cos^2 \Theta.$$

On écrit maintenant que cette puissance est la même que celle que prélèverait du faisceau incident une cible de section efficace différentielle  $d^2 \sigma / d^2 \Omega$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 P_R}{d^2 \Omega} &= \frac{d^2 P_0}{d^2 \sigma} \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} \\ &= \epsilon_0 c E_0^2 \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega}, \\ \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} &= r_0^2 \cos^2 \Theta. \end{aligned}$$

Cette expression est valable dans le cas d'un rayonnement incident polarisé. Si le rayonnement est non polarisé, on effectue une moyenne sur les deux polarisations équiprobables et orthogonales entre elles, soit

$$\overline{\cos^2 \Theta} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \theta)$$

d'où découle la section efficace différentielle non polarisée de Thomson,

$$\left( \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} \right)_{\text{Thomson nonpol.}} = r_0^2 \overline{\cos^2 \Theta} = r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right).$$

Par intégration sur les angles il vient la section efficace totale

$$\sigma_{\text{Thomson nonpol.}} = 2\pi \int_0^\pi r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) \sin \theta d\theta = \frac{8}{3} \pi r_0^2.$$

### Diffusion Thomson par un atome

Ayant calculé la diffusion par un électron, la réponse d'un atome s'obtient en sommant sur les  $Z$  électrons de l'atome. La densité électronique est notée  $n(\mathbf{r})$ , elle est normée conformément à  $\int_{\text{at.}} d^3 r n(\mathbf{r}) = Z$ . L'amplitude de diffusion élémentaire par l'élément de volume  $d^3 r$  est notée

$$d^3 A(\Omega) = (d^3 \sigma(\Omega))^{1/2} = -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) d^3 r.$$

Le signe  $-$  sera justifié un peu plus tard, mais il est sans importance pour le calcul de la section efficace. On a choisi ici de supposer qu'il s'agissait de rayonnement non polarisé et d'une détection non résolue en polarisation. Si ce n'est pas le cas, il suffit de changer le facteur de polarisation. Enfin, le terme en  $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  intervient pour tenir compte du déphasage  $-(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$  entre un rayon de référence diffusé par l'origine, au centre de l'atome, et par l'élément de volume  $d^3r$  repéré par  $\mathbf{r}$ . On en déduit le facteur de diffusion atomique des rayons  $X$ ,

$$\begin{aligned} A_{\text{non pol. Thomson}}(\Omega) &= -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} \int_{\text{at}} n(\mathbf{r}) d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} \tilde{n}(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Rappelons que ce résultat (diffusion élastique Thomson par un atome) a été obtenu dans la limite haute énergie où l'on a négligé l'énergie de liaison des électrons. Dans la limite des petits angles, on trouve le résultat très simple suivant

$$\begin{aligned} \tilde{n}(\mathbf{q}) &= \int_{\text{at}} n(\mathbf{r}) d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \simeq_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} Z \\ A_{\text{non pol. Thomson}}(\Omega) &\simeq_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} Z, \end{aligned}$$

c'est-à-dire que le facteur de diffusion atomique est simplement proportionnel au nombre d'électrons de l'atome et la section efficace correspondante au carré du numéro atomique,

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{\text{non pol. Thomson}} \simeq_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) Z^2.$$

Cela explique pourquoi on peut obtenir un bon contraste dans une expérience de diffusion des rayons  $X$  lorsque la cible contient des atomes des numéros atomiques très différents.

Si l'on va un peu au-delà de l'approximation des petits angles, on commence à explorer les caractéristiques géométriques de la distribution électronique. Supposons la distribution électronique à symétrie sphérique. La transformée de Fourier prend alors la forme simplifiée

$$\tilde{n}(\mathbf{q}) = \int_{\text{at}} n(\mathbf{r}) d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \frac{\sin qr}{qr} n(r)$$

et peut être développée lorsque  $qr \ll 1$ ,

$$\tilde{n}(\mathbf{q}) \simeq 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \left[ 1 - \frac{1}{6}(qr)^2 \right] n(r).$$

Avec  $4\pi \int_0^\infty r^2 dr n(r) = Z$  et  $4\pi \int_0^\infty r^2 dr r^2 n(r) = Z \langle r^2 \rangle$  (cette dernière expression définit le rayon quadratique moyen de l'atome), on obtient  $\tilde{n}(\mathbf{q}) \simeq Z \left( 1 - \frac{1}{6}q^2 \langle r^2 \rangle \right)$  et

finaleme

$$A_{\text{non pol. Thomson}}(\Omega) \simeq_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} Z \left( 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle \right)$$

$$\left( \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} \right)_{\text{Thomson non pol.}} \simeq_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) Z^2 \left( 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle \right)^2.$$

### Freinage par rayonnement

On considère de nouveau pour commencer le problème de la diffusion par un électron. Cette fois on tient compte de l'énergie de liaison. Cela signifie que cette énergie de liaison <sup>(37)</sup> n'est plus négligeable devant celle du faisceau incident. L'électron lié est ainsi assimilable à un oscillateur harmonique en régime forcé, qui dissipe par rayonnement une certaine énergie que l'on cherche à déterminer. La "force" de freinage associée à cette dissipation prend une forme complexe comme on va le voir, mais dans le régime faiblement amorti qui correspond à la situation physique, on obtient un frottement visqueux et les calculs se simplifient. On peut anticiper qu'il se produira une résonance lorsque la fréquence incidente  $\omega$  atteindra la pulsation caractéristique  $\omega_0$ , c'est le phénomène de fluorescence.

Comme précédemment, on se limite au cas d'un rayonnement incident non polarisé. On cherche à écrire le champ rayonné sous la forme

$$|\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t)| = \left| A_{\text{Ray.}}(\Omega) \frac{E_0}{r} e^{i\omega t} \right|$$

avec

$$|\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t)| = \frac{|q_e|}{4\pi\epsilon_0} \frac{\ddot{z}(t - r/c)}{r c^2} \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2}.$$

On suppose le rayonnement incident non polarisé, de sorte que le facteur de polarisation est déjà inclus. Le cas d'un rayonnement incident polarisé s'en déduirait facilement. La puissance élémentaire dissipée dans une surface élémentaire vaut  $\boldsymbol{\pi}_R \cdot d\mathbf{S} = \epsilon_0 c E_R^2$  <sup>(38)</sup>. Intégrée sur une sphère de rayon  $r$  pour donner la perte totale par rayonnement dans l'angle solide  $4\pi$ , elle conduit à

$$\begin{aligned} P_R &= \oint \boldsymbol{\pi} \cdot d\mathbf{S} \\ &= \int_0^\pi 2\pi r^2 \sin \theta d\theta \epsilon_0 c E_R^2 \\ &= 2\pi \epsilon_0 c \frac{|q_e|^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{(\ddot{z})^2}{r^2 c^4} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) d\theta}_{\int_{-1}^{+1} \frac{1+u^2}{2} du = \frac{4}{3}} \\ &= \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} (\ddot{z})^2. \end{aligned}$$

<sup>(37)</sup> Il s'agit typiquement d'un rappel élastique de pulsation propre  $\omega_0$ ,  $\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$ , où  $m \omega_0^2 =$

$\left( \frac{d^2 V(r)}{dr^2} \right)_{E_0}$ ,  $E_0$  étant l'énergie de liaison proprement dite.

<sup>(38)</sup> On néglige totalement l'effet de retard  $t - r/c$ .

C'est la formule de Larmor. On en déduit la perte d'énergie sur une période, dans l'approximation d'un régime sinusoïdal forcé de pulsation  $\omega$ ,

$$\begin{aligned}\Delta W &= - \int_0^T P_R(t) dt \\ &= - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \int_0^T (\ddot{z})^2 dt \\ &= - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \int_0^T \frac{d}{dt} \left[ \left( \frac{dz}{dt} \frac{d^2z}{dt^2} \right) - \frac{dz}{dt} \frac{d^3z}{dt^3} \right] dt \\ &= \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \int_0^T \frac{dz}{dt} \frac{d^3z}{dt^3} dt.\end{aligned}$$

Cela permet l'identification d'une force de freinage ( $\Delta W = \int F \dot{z} dt$ )

$$F = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{d^3z}{dt^3} \simeq - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega^2 \frac{dz}{dt}.$$

### Diffusion Rayleigh et fluorescence

La dynamique de l'électron en régime forcé est ainsi gouvernée par <sup>(39)</sup>

$$\ddot{z} + \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{m c^3} \dot{z} + \omega_0^2 z = - \frac{|q_e| E_0}{m} e^{i\omega t},$$

d'où, en posant  $\lambda = \frac{e^2 \omega_0^2}{3 m c^3}$  et en cherchant une solution en régime permanent  $z(t) = z_0 e^{i\omega t}$ ,

$$z_0 = - \frac{|q_e| E_0 / m}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\omega\lambda}.$$

Finalement la dépendance du champ rayonné se met sous la forme

$$\begin{aligned}- \frac{|q_e|}{4\pi\epsilon_0} \frac{\ddot{z}}{r c^2} &\simeq \frac{|q_e|}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega^2 z_0}{r c^2} e^{i\omega t} \\ &= -r_0 \frac{E_0}{r} e^{i\omega t} \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\omega\lambda},\end{aligned}$$

et l'amplitude de diffusion  $A_{\text{Ray.}}(\Omega) = \frac{d^2 f}{d^2 \Omega}$  et la section efficace différentielle en découlent,

$$\begin{aligned}\left( \frac{d^2 f}{d^2 \Omega} \right)_{\text{non pol}} &= -r_0 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)^{1/2} \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\omega\lambda}, \\ \left( \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} \right)_{\text{non pol}} &= r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) \frac{\omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2 \lambda^2}.\end{aligned}$$

<sup>(39)</sup> On fait l'hypothèse, non indispensable en fait, que la fréquence  $\omega$  qui apparaît dans la force de frottement peut être approximée par  $\omega_0$ . Cela permet d'avoir un coefficient de frottement indépendant de la fréquence de forçage. L'approximation est évidemment justifiée au voisinage de la résonance.



Le résultat obtenu est simplement la section efficace différentielle de diffusion Thomson corrigée par un facteur lorentzien dans lequel intervient la fréquence de résonance,

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{non pol}} = \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{Thomson non pol}} \times \left(\frac{\omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2\lambda^2}\right).$$

On obtient notamment les cas limite

$$\begin{aligned} \omega \rightarrow 0, \quad \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{non pol}} &= \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{Rayleigh non pol}} = \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{Thomson non pol}} \times \left(\frac{\omega^4}{\omega^4}\right), \\ \omega = \omega_0, \quad \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{non pol}} &= \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{fluoresc. non pol}} = \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{Thomson non pol}} \times \left(\frac{\omega_0^2}{4\lambda^2}\right), \\ \omega \rightarrow \infty, \quad \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{non pol}} &= \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}\right)_{\text{Thomson non pol}}. \end{aligned}$$



## 22

# Théorie de Rayleigh de la diffusion de la lumière

Les équations de Maxwell dans un milieu diélectrique linéaire de permittivité  $\varepsilon_0\varepsilon$  s'écrivent, en l'absence de charges et de courants libres,

$$\mathbf{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \mathbf{rot} \mathbf{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}.$$

Par application de  $\mathbf{rot} \mathbf{rot} \mathbf{E} = \vec{\nabla}(\operatorname{div} \mathbf{E}) - \vec{\nabla}^2 \mathbf{E}$ , on a

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \vec{\nabla}(\operatorname{div} \mathbf{E}).$$

En notant que  $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$  (pas de charges libres) où  $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}$ , si la permittivité relative  $\varepsilon(\mathbf{r})$  dépend du point considéré (milieu inhomogène), on peut écrire

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0 = \varepsilon_0 (\vec{\nabla} \varepsilon(\mathbf{r})) \mathbf{E} + \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \operatorname{div} \mathbf{E},$$

soit

$$\vec{\nabla}(\operatorname{div} \mathbf{E}) = -\vec{\nabla} \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E} \vec{\nabla} \varepsilon(\mathbf{r}) \right).$$

et l'équation des ondes devient

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\vec{\nabla} \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E} \vec{\nabla} \varepsilon(\mathbf{r}) \right).$$

Si l'on cherche une solution monochromatique  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$  sans présumer de la dépendance spatiale, on a simplement  $\partial_t^2 \mathbf{E} = -\omega^2 \mathbf{E}$ , d'où l'on déduit l'équation de Helmholtz inhomogène pour l'amplitude de l'onde

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) + \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \omega^2 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) = -\vec{\nabla} \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \varepsilon(\mathbf{r}) \right).$$

Pour un milieu faiblement inhomogène on peut écrire que la permittivité comprend une contribution dominante homogène  $\bar{\varepsilon}$  et une contribution non uniforme  $\delta\varepsilon(\mathbf{r}) \ll \bar{\varepsilon}$ , soit  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \bar{\varepsilon} + \delta\varepsilon(\mathbf{r})$ . Au premier ordre en perturbation on a donc

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) + \underbrace{\frac{\bar{\varepsilon} \omega^2}{c^2}}_{k^2} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) + \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{r}) \omega^2}{c^2} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \vec{\nabla} [\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r})],$$

ou encore en reportant toute la perturbation au second membre,

$$\vec{\nabla}^2 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \vec{\nabla} [\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r})] - k^2 \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{r})}{\bar{\varepsilon}} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}).$$

On envoie une onde électromagnétique plane polarisée

$$\mathbf{E}_0 = E_0 \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = E_0 \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i(kz - \omega t)}$$

dans le milieu diélectrique. Dans un milieu homogène, l'invariance par translation impose que l'onde plane soit la seule solution permise. Si le milieu est inhomogène en revanche, le phénomène de diffusion se produit, chaque impureté pouvant diffuser la lumière de sorte qu'à grande distance on obtienne, outre la composante plane transmise sans déformation, une composante diffusée ayant une structure d'onde sphérique sortante

$$\mathbf{E}_{\text{diff}} = \frac{d^2 \mathbf{f}}{d^2 \Omega} \frac{e^{ikr}}{r},$$

$\frac{d^2 \mathbf{f}}{d^2 \Omega}$  étant l'amplitude de diffusion qui peut dépendre de la direction.

Pour calculer cette amplitude de diffusion, on utilise la méthode des fonctions de Green. On compare pour cela l'équation inhomogène à l'équation homogène de même fréquence dont on a la solution par l'onde plane  $\mathbf{E}_0$ .

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2) (\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) - \mathbf{E}_0) = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \vec{\nabla} [\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r})] - k^2 \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{r})}{\bar{\varepsilon}} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}).$$

La fonction de Green  $G(\mathbf{r})$  est définie par la réponse à une perturbation unité,

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2) G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}),$$

et vaut (pour la partie sortante)

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r},$$

puis on décompose la perturbation sur la perturbation unité,

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \vec{\nabla}(\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r})) - k^2 \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{r})}{\bar{\varepsilon}} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \\
 & = -\frac{1}{\bar{\varepsilon}} \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left( \vec{\nabla}[\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}') \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}')] + k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}') \right).
 \end{aligned}$$

Il suffit alors de décomposer la solution cherchée sur la fonction de Green avec le même poids, c'est-à-dire qu'il suffit de remplacer dans l'équation ci-dessus  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  par  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ ,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) & = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \\
 & + \frac{1}{4\pi\bar{\varepsilon}} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left( \vec{\nabla}[\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}') \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}')] + k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}') \right).
 \end{aligned}$$

C'est l'équation intégrale de la diffusion.

Pour résoudre l'équation intégrale de la diffusion, on utilise une approximation analogue à l'approximation de Born en mécanique quantique, due dans le contexte de la diffusion de la lumière à Rayleigh, et qui consiste simplement à supposer le milieu faiblement inhomogène de sorte qu'on peut approximer  $\mathbf{E}_\omega$  par l'onde plane  $\mathbf{E}_0$  au second membre :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) & = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \\
 & + \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left[ \vec{\nabla} \left( \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \right) + k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \right].
 \end{aligned}$$

A grande distance on utilise l'approximation

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}$$

où l'on a posé  $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{e}}_r$ , vecteur d'onde diffusé dans la direction d'observation  $\mathbf{r}$ . On en déduit le champ diffusé

$$\mathbf{E}_{\text{diff}}(\mathbf{r}) = \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' \left[ \vec{\nabla} \left( \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \right) + k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \right] e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'},$$

ce qui permet l'identification de l'amplitude de diffusion

$$\frac{d^2\mathbf{f}}{d^2\Omega} = \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} \int d^3r' \left[ \vec{\nabla} \left( \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \right) + k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \right] e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}.$$

Pour obtenir une expression utilisable (c'est-à-dire éliminer les opérateurs différentiels qui figurent sous l'intégrale), on intègre deux fois par parties le premier

terme, en supposant que le champ décroît suffisamment rapidement pour que les termes de surface, ramenés à grande distance, disparaissent.

$$\int d^3r' \vec{\nabla} \left( \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') \right) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} = \underbrace{\left[ \hat{\mathbf{e}}_0 e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \right]_{\infty}}_0 - (-i\mathbf{k}') \int d^3r' \hat{\mathbf{e}}_0 \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}$$

avec l'introduction du vecteur diffusion  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ . On renouvelle l'opération,

$$\begin{aligned} \int d^3r' \hat{\mathbf{e}}_0 \vec{\nabla} \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} &= \hat{\mathbf{e}}_0 \left[ \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \right]_{\infty} \\ &\quad - \hat{\mathbf{e}}_0 \int d^3r' \delta\varepsilon(\mathbf{r}') (-i\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \\ &= i\mathbf{q} \hat{\mathbf{e}}_0 \int d^3r' \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \\ &= i\mathbf{k}' \hat{\mathbf{e}}_0 \delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}) \end{aligned}$$

où l'on a défini la transformée de Fourier de la partie inhomogène de la permittivité

$$\delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}) = \int d^3r' \delta\varepsilon(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'}$$

En regroupant avec le premier terme on obtient l'amplitude de diffusion sous la forme

$$\frac{d^2\mathbf{f}}{d^2\Omega} = \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} [k^2 \hat{\mathbf{e}}_0 - \mathbf{k}'(\mathbf{k}'\hat{\mathbf{e}}_0)] \delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q})$$

et donc le champ électrique diffusé

$$\mathbf{E}_{\text{diff}} = \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} [k^2 \hat{\mathbf{e}}_0 - \mathbf{k}'(\mathbf{k}'\hat{\mathbf{e}}_0)] \delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r}$$

La section efficace différentielle se déduit de l'amplitude,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \left| \frac{d^2\mathbf{f}}{d^2\Omega} \right|^2$$

Avec  $[k^2 \hat{\mathbf{e}}_0 - \mathbf{k}'(\mathbf{k}'\hat{\mathbf{e}}_0)]^2 = k^4 (1 - (\hat{\mathbf{e}}_r \hat{\mathbf{e}}_0)^2)$ , il vient

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \left( \frac{E_0}{4\pi\bar{\varepsilon}} \right)^2 k^4 (1 - (\hat{\mathbf{e}}_r \hat{\mathbf{e}}_0)^2) |\delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q})|^2$$

Pour un rayonnement incident non polarisé, on effectue la moyenne pour deux polarisations orthogonales équiprobables. Lorsque  $\hat{\mathbf{e}}_0$  est dans le plan  $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ,  $\hat{\mathbf{e}}_r \hat{\mathbf{e}}_0 =$

$\sin \theta$  et lorsque la polarisation incidente est dans le plan perpendiculaire,  $\hat{\mathbf{e}}_r \hat{\mathbf{e}}_0 = 0$  (on note  $\theta$  l'angle entre les vecteurs d'onde incident et diffusé). On a donc en moyenne

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{\text{non pol.}} = \left( \frac{E_0}{4\pi\bar{\epsilon}} \right)^2 k^4 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) |\delta\bar{\epsilon}(\mathbf{q})|^2.$$

A titre d'exemple, considérons la diffusion par une sphère diélectrique de rayon  $a$  et d'indice de réfraction homogène, mais légèrement différent de celui du milieu infini dans lequel elle est plongée. On détermine la section efficace de diffusion simplement en évaluant la transformée de Fourier de  $\delta\epsilon(\mathbf{r}) = \delta\epsilon_0$  si  $r \leq a$  et 0 sinon.

$$\begin{aligned} \delta\bar{\epsilon}(\mathbf{q}) &= \int_0^a \int_0^\pi 2\pi \sin \theta' d\theta' r'^2 dr' \delta\epsilon_0 e^{-iqr' \cos \theta'} \\ &= \frac{4\pi}{q} \delta\epsilon_0 \int_0^a r' \sin qr' dr' \\ &= \frac{4\pi}{q^3} \delta\epsilon_0 (\sin qa - qa \cos qa), \end{aligned}$$

soit

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{\text{non pol.}} = E_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) \left( \frac{\delta\epsilon_0}{\bar{\epsilon}} \right)^2 \left( \frac{k}{q} \right)^4 \left( \frac{\sin qa}{q} - a \cos qa \right)^2,$$

avec  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ .

**132**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*



## 23

# Absorption, émission, coefficients d'Einstein

### Interactions atome-champ

En présence d'un champ électromagnétique  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\vec{\nabla}\phi(\mathbf{r}, t) - \partial_t\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \vec{\nabla}\wedge\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  on utilise la règle du couplage minimal  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ ,  $H \rightarrow H - q\phi$ , ce qui fait apparaître les termes

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r) + q\phi - \frac{q}{2m}(\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) + \frac{q^2\mathbf{A}^2}{2m} - \boldsymbol{\mu}_s\mathbf{B},$$

où l'on a explicitement inclus l'interaction avec le moment magnétique de spin de l'électron,  $\boldsymbol{\mu}_s = \frac{q}{m}\mathbf{s}$  (avec  $q = -|q_e|$  et un facteur de Landé électronique de 2<sup>(40)</sup>). Le choix de jauge de Coulomb assure que  $[\mathbf{p}, \mathbf{A}] = -i\hbar\vec{\nabla}\mathbf{A} = 0$  et on obtient finalement trois termes perturbatifs dépendant du temps (en représentation de Heisenberg) après avoir incorporé  $q\phi(\mathbf{r})$  dans le potentiel,

$$H = H_0 + W_1(\mathbf{r}, t) + W_2(\mathbf{r}, t) + W_3(\mathbf{r}, t)$$

$$W_1(\mathbf{r}, t) = \frac{|q_e|}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

$$W_2(\mathbf{r}, t) = \frac{|q_e|}{m}\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$$

$$W_3(\mathbf{r}, t) = \frac{|q_e|^2\mathbf{A}^2(\mathbf{r}, t)}{2m}$$

<sup>(40)</sup> La valeur 2 est approximative. Elle se déduit de l'équation de Dirac, mais des corrections dites radiatives viennent modifier très légèrement la valeur 2. La valeur prédite est toutefois en accord exceptionnel avec les mesures.

Le troisième terme (dit diamagnétique) est d'ordre 2 en perturbation. Il n'est pris en compte que lorsque les termes  $W_1$  ou  $W_2$  n'ont pas de contribution au premier ordre. Parmi les deux termes d'ordre 1, le terme  $W_1$  (appelé paramagnétique) est dominant à basse fréquence et jusque dans l'UV. En effet, pour une onde plane de vecteur d'onde  $k$  et d'amplitude  $A_0$ , l'amplitude du champ magnétique est de la forme  $B_0 \simeq kA_0$ . Avec  $k \simeq 1/\lambda$ ,  $s \simeq \hbar$  et  $p \simeq \hbar/a_0$ , on a donc  $W_2/W_1 \simeq a_0/\lambda$  qui est négligeable jusque dans le visible et l'UV.

### Traitement semi-classique des processus inélastiques

Dans les processus inélastiques, l'état de l'atome est modifié au cours de l'interaction. En 1916, Einstein en a proposé une théorie phénoménologique basée sur le modèle de l'atome à deux niveaux de Bohr, pour retrouver la loi de Planck du rayonnement d'équilibre thermique. On propose ici de traiter ce problème par l'approche semi-classique dans laquelle seul l'atome est quantifié. Les phénomènes initialement pris en compte sont l'absorption,  $\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i > 0$ , et l'émission spontanée,  $\hbar\omega_{fi} = E_i - E_f > 0$ .

L'émission spontanée est décrite empiriquement comme résultant de la largeur naturelle de l'état excité,  $E_2$ , notée  $\Delta E_2$ , à laquelle correspond un temps caractéristique,  $\tau_{sp} \sim \hbar/\Delta E_2$ . Si l'on note  $N_2$  la population de cet état, on a donc

$$\frac{dN_2}{N_2} = -\frac{dt}{\tau_{sp}} = -A_{12} dt,$$

soit une loi de décroissance exponentielle de la population de l'état excité en l'absence d'autre phénomène. Pour évaluer l'ordre de grandeur de la valeur du coefficient d'émission spontanée, on estime l'énergie dissipée par le dipôle oscillant <sup>(41)</sup>.

$$p(t) = -|q_e|r_0 \cos \omega_{21}t.$$

On en déduit  $\bar{p}(t)$  et la moyenne temporelle  $\overline{\dot{p}(t)} = \frac{1}{2}\omega_{21}^4|q_e|^2r_0^2$ . On note  $\frac{dU}{dt}$  l'énergie dissipée par un dipôle oscillant par unité de temps, on a alors

$$N_2 \left| \frac{dU}{dt} \right| = \hbar\omega_{21} \left| \frac{dN_2}{dt} \right| = \hbar\omega_{21}N_2A_{12}.$$

Il reste à évaluer  $\frac{dU}{dt} = -4\pi r^2|\pi_R|$  où  $\pi_R = \varepsilon_0 c E_R^2 \mathbf{u}_r$  est le vecteur de Poynting rayonné par le dipôle, soit  $E_R = \dot{p}(t)/4\pi\varepsilon_0 r c^2$ . Il vient finalement

$$\left| \frac{dU}{dt} \right| = \frac{|q_e|^2 r_0^2 \omega_{21}^4}{8\pi\varepsilon_0 c^3},$$

$$A_{12} = \frac{|q_e|^2 r_0^2 \omega_{21}^3}{8\pi\varepsilon_0 \hbar c^3}.$$

Comme  $A_{12} \sim \omega_{12}^3$ , l'émission spontanée est d'autant plus importante que la fréquence est élevée.

A côté de l'émission spontanée, l'absorption est également un phénomène connu (au travers par exemple de la loi de Beer-Lambert qui exprime l'atténuation

<sup>(41)</sup> L'atome dans l'état excité est assimilé à un atome oscillant à la fréquence de Bohr.

exponentielle d'un faisceau traversant la matière). La population de l'état fondamental décroît par absorption d'autant plus vite que la densité d'énergie du rayonnement incident est élevée, soit

$$dN_1 = -N_1 B_{21} u_{\omega_{21}} dt,$$

le temps caractéristique associé n'est donc plus une donnée intrinsèque, mais dépend de la densité d'énergie.

En présence d'un rayonnement accordé sur la fréquence de Bohr, si l'on prend en compte uniquement les deux phénomènes précédents, le bilan détaillé sur les transferts de population conduit à l'égalité  $dN_1 = dN_2$ , soit  $N_1 B_{21} u_{\omega_{21}} = N_2 A_{12}$ . En écrivant qu'à l'équilibre thermique on attend une statistique de Boltzmann pour le rapport de population,  $N_1/N_2 = A_{12}/B_{21} u_{\omega_{21}} = e^{-(E_1-E_2)/k_B T}$ , on obtient une densité d'énergie incompatible avec la loi de Planck,  $u_{\omega_{21}} = \frac{A_{12}}{B_{21}} e^{-\hbar\omega_{21}/k_B T}$ . Pour réconcilier cette approche phénoménologique avec la loi de Planck, Einstein a supposé l'existence d'un nouveau phénomène d'émission proportionnel à la densité d'énergie, de sorte que la population de l'état excité soit régie par

$$dN_2 = -(B_{12} u_{\omega_{21}} + A_{12}) N_2 dt.$$

C'est l'émission stimulée (ou induite) et le bilan détaillé donne cette fois

$$N_1 B_{21} u_{\omega_{21}} = N_2 (B_{12} u_{\omega_{21}} + A_{12})$$

ce qui conduit à la bonne forme

$$u_{\omega_{21}} = \frac{A_{12}}{B_{21} e^{\hbar\omega_{21}/k_B T} - B_{12}}$$

et par identification à la loi de Planck,

$$B_{21} = B_{12} = B, \quad \frac{A_{12}}{B} = \frac{\hbar\omega_{21}^3}{\pi^2 c^3}.$$

Les coefficients  $B$  sont donc indépendants de la fréquence.

Précisons que si l'on tient compte des dégénérescences des niveaux, les relations ci-dessus sont légèrement modifiées.

### Eléments de matrice d'interaction

L'élément de matrice qui apparaît dans la règle d'or de Fermi couple l'état initial et l'état final par la partie indépendante du temps dans la perturbation. On écrit  $|i\rangle = |\varphi_i\rangle \otimes |n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  l'état initial,  $|\varphi_i\rangle$  étant l'état atomique initial et  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  l'état initial du champ. De même, l'état final se décompose selon  $|f\rangle = |\varphi_f\rangle \otimes |n_{\mathbf{k}'\lambda'}\rangle$ .

La perturbation peut être de la forme  $\hat{W}^+ e^{-i\omega t}$ , où  $\hat{W}^+$  est une somme de termes de la forme  $f_+(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \hat{V}^+(\mathbf{r})$  agissant dans l'espace des états  $|\varphi\rangle \otimes |n_{\mathbf{q}\epsilon}\rangle$ . On écrit alors

$$\hat{W}(\mathbf{r}, t) = f_+(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \hat{V}^+(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}.$$

C'est par exemple le cas d'un terme de la forme (représentation de Schrödinger)

$$\hat{W}^+ = \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \hat{a}_{\mathbf{q}\epsilon} \mathbf{P} \hat{\epsilon}_{\mathbf{q}\epsilon} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

qui décrit un processus d'absorption (action d'un opérateur annihilation sur l'état initial du champ). La perturbation peut également être de la forme  $\hat{W}^- e^{i\omega t}$ , soit

$$\hat{W}^-(\mathbf{r}, t) = f_-(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \hat{V}^-(\mathbf{r}) e^{i\omega t},$$

par exemple

$$\hat{W}^- = \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$$

qui décrit un processus d'émission (action d'un opérateur création sur l'état initial du champ).

Compte-tenu de ces notations, les éléments de matrice s'écrivent comme des sommes de termes comprenant des produits d'éléments de matrice sur les états atomiques et sur les états du champ,

$$\langle \varphi_f | \hat{V}(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle \langle n_{\mathbf{k}'\lambda'} | f(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle.$$

Les éléments de matrice atomiques déterminent les règles de sélection et ceux du champ permettent d'identifier aisément le type de processus mis en jeu (création ou annihilation de photons). Par exemple les termes associés aux processus d'absorption et d'émission sont dus à une perturbation linéaire en  $\mathbf{A}$ , pour être linéaire en  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$ , soit  $\hat{W}_1(\mathbf{r}, t)$ . Ils sont de la forme

$$W_{fi}^+ = \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \langle \varphi_f | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \varphi_i \rangle \langle n_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon} | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle$$

$$W_{fi}^- = \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \langle \varphi_f | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \varphi_i \rangle \langle n_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle$$

Ce sont ces éléments de matrice qui déterminent l'amplitude des processus. La perturbation  $\hat{W}_2$  produit des phénomènes du même type (également linéaire en  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$ ), mais comme on l'a vu elle est négligeable dans le visible.

La densité d'états du rayonnement dans l'état final pour une polarisation déterminée est obtenue en comptant le nombre d'états  $dn_\varepsilon$  pouvant occuper le volume élémentaire  $k'^2 dk' d^2\Omega$ , soit

$$d^3n_\varepsilon = \frac{k'^2 dk' d^2\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\omega'^2 dE' d^2\Omega}{(2\pi/L)^3 \hbar c^3} = \rho_\varepsilon(E', \Omega) dE' d^2\Omega,$$

où l'on a utilisé la relation de dispersion des photons  $E = \hbar c |\mathbf{k}|$ .

L'approximation dipolaire électrique consiste à mettre à profit la valeur importante de la longueur d'onde devant l'extension spatiale des fonctions d'onde, de sorte que les termes  $e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\pm i\mathbf{q}\mathbf{r})^n$  puissent être approximés par 1 sans erreur notable. Cela revient à remplacer partout  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  par  $\mathbf{A}(0, t)$ , l'atome ressentant un potentiel variable, mais uniforme à tout instant.

**Emission spontanée**

L'émission spontanée consiste à passer d'un état du champ vide (ou en tout cas tel que le mode sur lequel on travaille soit non peuplé dans l'état initial) à un état final à 1 photon. Dans ces conditions, l'élément de matrice pertinent s'écrit

$$\begin{aligned}
 W_{fi}^{sp.} &= \langle \varphi_m \otimes 1_{\mathbf{k}\lambda} | \hat{W}^- | \varphi_n \otimes 0_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \langle \varphi_m | \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* | \varphi_n \rangle \langle 1_{\mathbf{k}\lambda} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger | 0_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \langle \varphi_m | \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^* | \varphi_n \rangle \sqrt{1} \underbrace{\langle 1_{\mathbf{k}\lambda} | 1_{\mathbf{k}\lambda} \rangle}_1.
 \end{aligned}$$

Dans ce qui précède,  $|\varphi_n\rangle$  est l'état atomique initial. C'est un état excité. Il se désexcite en un état atomique de plus basse énergie,  $|\varphi_m\rangle$ , qui peut éventuellement être l'état fondamental.

On peut transformer l'élément de matrice à condition que les états spatiaux soient bien états propres de l'hamiltonien non perturbé. Dans ce cas en effet on peut utiliser la relation

$$[\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}, H_0] = i \frac{\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}},$$

où  $\hat{\mathbf{e}}$  est unitaire dans une direction arbitraire. En insérant ce commutateur entre les états  $|\varphi_n\rangle$  et  $|\varphi_m\rangle$ , on obtient

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_m | \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{e}} | \varphi_n \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle \varphi_m | [\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}, H_0] | \varphi_n \rangle \\
 &= im\omega_{mn} \langle \varphi_m | \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}} | \varphi_n \rangle,
 \end{aligned}$$

avec  $\omega_{mn} = (E_n - E_m)/\hbar$  la fréquence de Bohr associée à la transition.

$$\begin{aligned}
 W_{fi}^{sp.} &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} im\omega_{mn} \langle \varphi_m | \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^* | \varphi_n \rangle \\
 &= \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} im\omega_{mn} d_{mn},
 \end{aligned}$$

où l'on a défini l'élément de matrice moment dipolaire

$$d_{mn} = \langle \varphi_m | |q_e| \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^* | \varphi_n \rangle.$$

L'application de la règle d'or de Fermi donne alors

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \Gamma_{fi}^{sp.}}{d^2 \Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{m^2} \frac{1}{2\varepsilon_0 L^3} \frac{\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}} m^2 \omega_{mn}^2 |d_{mn}|^2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{\hbar c^3} \\
 &= \frac{1}{8\pi^2 \varepsilon_0} \frac{\omega_{\mathbf{k}}^3}{\hbar c^3} |d_{mn}|^2
 \end{aligned}$$

en utilisant la conservation de l'énergie qui impose  $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{mn}$ .

Notons qu'il s'agit bien de l'interaction de l'atome avec le champ électromagnétique,  $|q_e| \mathbf{p} \mathbf{A} / m$ , mais avec l'état du vide comme état initial. C'est un mécanisme que l'approche semi-classique, dans laquelle le champ n'est pas quantifié, était incapable de décrire.

### Emission stimulée

Pour l'émission stimulée, on change simplement l'état initial du champ (et par conséquent l'état final également), qui est maintenant un état déjà peuplé dans le mode qui va s'enrichir d'un photon supplémentaire par désexcitation induite de l'atome.

$$\begin{aligned}
 W_{fi}^{st.} &= \langle \varphi_m \otimes n_{\mathbf{k}\lambda} + 1 | \hat{W}^- | \varphi_n \otimes n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \langle \varphi_m | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* | \varphi_n \rangle \langle n_{\mathbf{k}\lambda} + 1 | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \langle \varphi_m | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^* | \varphi_n \rangle \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \\
 &= \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} i m \omega_{mn} d_{mn} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1}.
 \end{aligned}$$

Il en découle que la seule modification provient du terme  $n_{\mathbf{k}\lambda} + 1$  en facteur dans la probabilité de transition :

$$\frac{d^2 \Gamma_{fi}^{st.}}{d^2 \Omega} = \frac{1}{8\pi^2 \varepsilon_0} \frac{\omega_{\mathbf{k}}^3}{\hbar c^3} (n_{\mathbf{k}\lambda} + 1) |d_{mn}|^2.$$

### Absorption

De manière analogue, l'absorption est décrite par un processus équivalent, mais l'excitation de l'atome de l'état  $|\varphi_m\rangle$  vers l'état  $|\varphi_n\rangle$  au détriment d'un photon absorbé à l'état initial du champ :

$$\begin{aligned}
 W_{fi}^{abs.} &= \langle \varphi_n \otimes n_{\mathbf{k}\lambda} - 1 | \hat{W}^+ | \varphi_m \otimes n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}} \langle \varphi_n | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* | \varphi_m \rangle \langle n_{\mathbf{k}\lambda} - 1 | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon} | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\
 &= \frac{|q_e|}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \langle \varphi_n | \mathbf{p} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}^* | \varphi_m \rangle \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}} \\
 &= \frac{1}{m} \left( \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} i m \omega_{mn} d_{nm} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}}.
 \end{aligned}$$

Cette fois la modification provient du terme  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  en facteur dans la probabilité de transition :

$$\frac{d^2 \Gamma_{fi}^{abs.}}{d^2 \Omega} = \frac{1}{8\pi^2 \varepsilon_0} \frac{\omega_{\mathbf{k}}^3}{\hbar c^3} n_{\mathbf{k}\lambda} |d_{nm}|^2.$$

Les deux processus d'absorption et d'émission stimulée correspondent à des probabilités asymptotiquement identiques dans la limite des modes à grand nombre de photons.

### Coefficients d'Einstein

La quantité  $|dN/N|$  représente une probabilité élémentaire de transition, soit

i) émission spontanée,

$$\left| \frac{dN}{N} \right| = A_{mn} dt = dP_{fi} = \Gamma_{fi}^{sp.} dt,$$

avec

$$A_{mn} = \Gamma_{fi}^{sp.} = \int \frac{d^2\Gamma_{fi}^{sp.}}{d^2\Omega} d^2\Omega.$$

On notera que les indices  $m$  et  $n$  se réfèrent comme précédemment aux états atomiques ( $m$  pour l'état le plus bas en énergie et  $n$  pour l'état excité), alors que  $f$  et  $i$  concernent les états final et initial du système complet incluant atome et champ.

ii) émission stimulée,

$$\left| \frac{dN}{N} \right| = B_{mn} u_\omega dt = dP_{mn} = \Gamma_{fi}^{st.} dt,$$

avec

$$u_\omega B_{mn} = \Gamma_{fi}^{st.} = \int \frac{d^2\Gamma_{fi}^{st.}}{d^2\Omega} d^2\Omega.$$

iii) absorption,

$$\left| \frac{dN}{N} \right| = B_{nm} u_\omega dt = dP_{nm} = \Gamma_{fi}^{abs.} dt,$$

avec

$$u_\omega B_{nm} = \Gamma_{fi}^{abs.} = \int \frac{d^2\Gamma_{fi}^{abs.}}{d^2\Omega} d^2\Omega.$$

On peut donc écrire que la rapport des populations atomiques dans les deux niveaux suit une loi de Boltzmann à l'équilibre thermodynamique en présence de rayonnement, soit

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{\Gamma_{fi}^{abs.}}{\Gamma_{fi}^{st.}} = \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda}}{\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda} + 1} = e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}.$$

A l'équilibre on a donc

$$\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{mn}} - 1}$$

que l'on peut comparer à la densité spectrale d'énergie du corps noir,

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

pour obtenir la relation de proportionnalité

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \bar{n}_{\mathbf{k}\lambda}.$$

Comme on a par ailleurs

$$B_{mn} = \frac{1}{u_\omega} \int \frac{d^2\Gamma_{fi}^{st.}}{d^2\Omega} d^2\Omega$$

en remplaçant  $u_\omega$  et  $\frac{d^2\Gamma_{fi}^{st.}}{d^2\Omega}$  par les expressions obtenues auparavant, on obtient pour l'émission spontanée

$$B_{mn} = \frac{1}{8\hbar^2 \varepsilon_0} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda} + 1}{\bar{n}_{\mathbf{k}\lambda}} \int |d_{mn}|^2 d^2\Omega.$$

Pour le coefficient d'Einstein décrivant l'absorption on a simplement une simplification des nombres de photons

$$B_{nm} = \frac{1}{8\hbar^2 \varepsilon_0} \int |d_{nm}|^2 d^2\Omega,$$

et ces coefficients sont asymptotiquement les mêmes.

On peut noter que les règles de sélection de ces trois mécanismes sont les mêmes, puisque c'est le même élément de matrice  $|d_{mn}|$  qui intervient dans chaque expression.



## 24

# Théorie de Wigner et Weisskopf de l'émission spontanée

### Dynamique aux temps longs

Le calcul perturbatif ne permet pas de retrouver la loi exponentielle de décroissance des populations observée empiriquement lors de l'émission spontanée. Pour déterminer la dynamique aux temps longs il faut avoir recours à une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger en partant d'une *ansatz* convenable pour la forme de la fonction d'onde.

Un système physique (l'atome) est initialement dans un état excité  $|e\rangle$  dans le vide  $|0\rangle$ . L'état initial du système atome-champ est alors  $|i\rangle = |e; 0\rangle \equiv |e\rangle \otimes |0\rangle$  et son énergie est notée  $E_e$ . L'atome est susceptible de se désexciter vers l'état fondamental  $|g\rangle$  d'énergie  $E_g$  en émettant un photon (on se limitera au processus à un seul photon) dans un mode  $\mathbf{k}, \lambda$  a priori quelconque mais avec  $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = E_e - E_g \equiv \hbar\omega_0$ , de sorte que l'état final soit de la forme  $|f\rangle = |g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle \equiv |g\rangle \otimes |1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$ . L'état initial est de la forme  $|e; 0\rangle$  et l'état final est l'un des états  $|g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$  de sorte que l'on peut poser l'état à l'instant  $t$  comme une superposition,

$$|\psi(t)\rangle = \gamma_0(t) e^{-iE_e t/\hbar} |e; 0\rangle + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{-iE_g t/\hbar} |g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$$

où les facteurs de phase sont une simple commodité. En passant à la limite continue, on a

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \dots \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int k^2 dk d^2\Omega \sum_{\lambda} \dots = \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \dots$$

Compte-tenu de ces notations, l'état du système à l'instant initial et au temps  $t$  peut s'écrire

$$|\psi(0)\rangle = |e; 0\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \gamma_0(t) e^{-iE_e t/\hbar} |e; 0\rangle + \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{-iE_g t/\hbar} |g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle.$$

La quantité  $\rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}})$  est la densité d'états en énergie (résolue en polarisation) du photon émis dans l'état final,  $\gamma_0(t)$  l'amplitude pour que le système soit dans l'état initial et  $\gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t)$  celle pour qu'il soit dans un état final à 1 photon dans le mode  $\mathbf{k}, \lambda$  (c'est le poids de cet état dans la somme).

On se limitera par la suite à l'approximation dipolaire électrique en jauge de Coulomb et au terme paramagnétique traité au premier ordre,

$$H = H_0 + \frac{|q_e|}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\vec{0}, t).$$

On rappelle que le terme de couplage atome-champ s'écrit

$$\frac{|q_e|}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\vec{0}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} (W_{\mathbf{q},\varepsilon}^- e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} + W_{\mathbf{q},\varepsilon}^+ e^{i\omega_{\mathbf{q}} t})$$

$$W_{\mathbf{q},\varepsilon}^- = \frac{|q_e|}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\mathbf{q}}}} (\mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}) a_{\mathbf{q},\varepsilon},$$

$$W_{\mathbf{q},\varepsilon}^+ = (W_{\mathbf{q},\varepsilon}^-)^\dagger.$$

L'action de l'hamiltonien sur le vecteur d'état au temps  $t$  donne

$$H|\psi(t)\rangle = \gamma_0(t) e^{-iE_e t/\hbar} \left[ E_e + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} (W_{\mathbf{q},\varepsilon}^- e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} + W_{\mathbf{q},\varepsilon}^+ e^{i\omega_{\mathbf{q}} t}) \right] |e; 0\rangle$$

$$+ \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{-iE_g t/\hbar} \left[ E_g + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} (W_{\mathbf{q},\varepsilon}^- e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} + W_{\mathbf{q},\varepsilon}^+ e^{i\omega_{\mathbf{q}} t}) \right] |g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle.$$

La dérivée temporelle de ce même état vaut

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = i\hbar \left[ \dot{\gamma}_0(t) - \frac{i}{\hbar} E_e \gamma_0(t) \right] e^{-iE_e t/\hbar} |e; 0\rangle$$

$$+ i\hbar \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \left[ \dot{\gamma}_{\mathbf{k},\lambda}(t) - \frac{i}{\hbar} E_g \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) \right] e^{-iE_g t/\hbar} |g; 1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$$

Par projection sur  $\langle e; 0|$  on obtient après simplification des termes en  $E_e$

$$\sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{-iE_g t/\hbar} + e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \langle e; 0| W_{\mathbf{k},\lambda}^- |1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = i\hbar \dot{\gamma}_0(t) e^{-iE_e t/\hbar}$$

L'élément de matrice vaut

$$\langle e; 0 | W_{\mathbf{k},\lambda}^- | 1_{\mathbf{k},\lambda} \rangle = \langle e; 0 | (W_{\mathbf{k},\lambda}^+)^{\dagger} | 1_{\mathbf{k},\lambda} \rangle = \langle 1_{\mathbf{k},\lambda} | W_{\mathbf{k},\lambda}^+ | e; 0 \rangle^* \equiv W_{fi}^*.$$

La dynamique du coefficient  $\gamma_0(t)$  est finalement gouvernée par l'équation

$$i\hbar\dot{\gamma}_0(t) = \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t} W_{fi}^*.$$

Par projection sur  $\langle g; 1_{\mathbf{k}',\lambda'} |$  on a (attention on utilise le produit scalaire pondéré par la densité d'états,

$$\langle g; 1_{\mathbf{k}',\lambda'} | g; 1_{\mathbf{k},\lambda} \rangle = \left( \int \psi_g^*(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}) d^3r \right) \delta_{\lambda,\lambda'} \int dE_{\mathbf{k}} g(E_{\mathbf{k}}) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$$

qui sélectionne  $\lambda = \lambda'$  et  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ )

$$\begin{aligned} \gamma_0(t) e^{-iE_e t/\hbar} \langle 1_{\mathbf{k}',\lambda'} | W_{\mathbf{k}',\lambda'}^+ | e; 0 \rangle e^{i\omega_{\mathbf{k}'} t} \\ + \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{-iE_g t/\hbar} E_g \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \delta_{\lambda,\lambda'} \\ = \gamma_0(t) e^{-iE_e t/\hbar} W_{fi} e^{i\omega_{\mathbf{k}'} t} + \rho_{\lambda'}(E_{\mathbf{k}'}) \gamma_{\mathbf{k}',\lambda'}(t) e^{-iE_g t/\hbar} E_g \\ = i\hbar \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \left[ \dot{\gamma}_{\mathbf{k},\lambda}(t) - \frac{i}{\hbar} E_g \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) \right] e^{-iE_g t/\hbar} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \delta_{\lambda,\lambda'} \\ = i\hbar \dot{\gamma}_{\mathbf{k}',\lambda'}(t) e^{-iE_g t/\hbar}. \end{aligned}$$

Après arrangement des termes qui survivent et retour aux variables non primées on obtient

$$i\hbar\dot{\gamma}_{\mathbf{k},\lambda}(t) = \gamma_0(t) e^{-i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t} W_{fi}.$$

L'intégration de cette dernière équation donne

$$\gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) = \frac{1}{i\hbar} W_{fi} \int_0^t e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0)t'} \gamma_0(t') dt'.$$

Cette expression est injectée dans la première équation pour obtenir la dynamique de  $\gamma_0(t)$  sous la forme d'une équation intégral-différentielle,

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\gamma}_0(t) &= \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t} W_{fi}^* \\ &= \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\hbar} |W_{fi}|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t} \int_0^t e^{-i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t'} \gamma_0(t') dt' \end{aligned}$$

Mis à jour le 11 Septembre 2007

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma}_0(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\lambda} \int \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} |W_{fi}|^2 \int_0^t dt' e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})(t-t')} \gamma_0(t') \\
&= -\int_0^t dt' \gamma_0(t') \int dE_{\mathbf{k}} g(E_{\mathbf{k}}, t-t') \\
&\quad \text{où } g(E_{\mathbf{k}}, t'') = \hbar^{-2} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) |W_{fi}|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t''} \\
&= -\int_0^t dt'' \gamma_0(t-t'') \int dE_{\mathbf{k}} g(E_{\mathbf{k}}, t'') \\
&= -\int_0^t dt'' \gamma_0(t-t'') h(t'') \\
&\quad \text{où } h(t'') = \int dE_{\mathbf{k}} g(E_{\mathbf{k}}, t'') \\
&\simeq -\gamma_0(t) \int_0^{\infty} dt'' h(t'') \\
&\simeq -\gamma_0(t) \left( \frac{1}{2} \Gamma + i\delta\omega \right).
\end{aligned}$$

On admet la propriété suivante (au sens des distributions, c'est-à-dire par action sur une fonction test assez régulière)

$$\int_0^{\infty} e^{i\Omega t} \cdot dt = \pi \langle \delta(\Omega), \cdot \rangle + i \left\langle \text{PP} \left( \frac{1}{\Omega} \right), \cdot \right\rangle$$

où la partie principale est une prescription de calcul de l'intégrale qui évite la singularité en 0,

$$\left\langle \text{PP} \left( \frac{1}{\Omega} \right), f \right\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{-\epsilon} + \int_{\epsilon}^{\infty} \right) \frac{f(\Omega')}{\Omega'} d\Omega'.$$

Cela permet le calcul (formel) de l'intégrale,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \Gamma + i\delta\omega &= \int_0^{\infty} dt'' h(t'') \\
&= \int_0^{\infty} dt'' \int dE_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) |W_{fi}|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_{\mathbf{k}})t''} \\
&= \int dE_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) |W_{fi}|^2 \pi \delta(E_e - E_g - \hbar\omega_{\mathbf{k}}) \\
&\quad + i \text{PP} \left[ \int dE_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(E_{\mathbf{k}}) |W_{fi}|^2 \frac{1}{E_e - E_g - \hbar\omega_{\mathbf{k}}} \right]
\end{aligned}$$

On retrouve en particulier la règle d'or de Fermi,

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(E_e - E_g) |W_{fi}|^2.$$

Par intégration de l'équation dynamique on a pour  $\gamma_0(t)$

$$\gamma_0(t) = \gamma_0(0) e^{-\frac{1}{2}\Gamma t} e^{-i\delta\omega t}$$

avec ici  $\gamma_0(0) = 1$  d'après les conditions initiales. Pour le poids sur les états désexcités on obtient

$$\gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) = \frac{W_{fi}}{i\hbar} \int_0^t e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0 - \delta\omega)t'} e^{-\frac{1}{2}\Gamma t'} dt'$$

soit en effectuant l'intégration

$$\gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t) = \frac{W_{fi} [e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - (\omega_0 + \delta\omega) + \frac{1}{2}i\Gamma)t} - 1]}{\hbar(\omega_{\mathbf{k}} - (\omega_0 + \delta\omega)) - \frac{1}{2}i\hbar\Gamma}.$$

On en déduit la probabilité de survie de l'état excité

$$P_0(t) = |\gamma_0(t)|^2 = e^{-\Gamma t}$$

et la probabilité de désexcitation (plus facilement obtenue par conservation de la probabilité totale que par sommation sur tous les états désexcités)

$$1 - P_0(t) = 1 - e^{-\Gamma t}.$$

On obtient bien la loi de décroissance exponentielle souhaitée. Aux temps courts on retrouve le résultat perturbatif  $1 - P_0(t) \simeq \Gamma t$ .

### Temps de vie, profil de raie spectrale et Lamb shift

On peut interpréter  $\Gamma$  comme l'inverse de la durée de vie  $\tau$  du niveau excité. De même, en notant que  $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$ , on peut poser  $\omega_0 + \delta\omega = (\bar{E}_e - E_g)/\hbar$  avec  $\bar{E}_e = E_e + \hbar\delta\omega$  la position réelle de l'énergie du niveau excité. Le terme  $\hbar\delta\omega$  est le *Lamb shift*, décalage en énergie de l'état excité dû à l'interaction de l'atome avec le vide quantique. Le calcul de cette quantité n'est cependant pas facile (cf le cours de Laverne par exemple).

Le profil en énergie de la raie d'émission s'obtient en passant à la limite des temps longs,

$$|\gamma_{\mathbf{k},\lambda}(t \rightarrow \infty)|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2\Gamma^2/4 + \hbar^2(\omega_{\mathbf{k}} - (\omega_0 + \delta\omega))^2}$$

et prend une forme lorentzienne (dans la limite d'un élément de matrice constant) dont la largeur est définie par  $\Gamma$  et la position par  $\delta\omega$  (c'est-à-dire déplacée par rapport à la fréquence de Bohr de la transition d'une quantité égale au Lamb shift).

**146**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

## 25

# Photo-ionisation de l'hydrogène

On s'intéresse à un processus de diffusion dû au terme paramagnétique, comme dans le cas de l'absorption et de l'émission, au cours duquel un faisceau de lumière incidente caractérisé par une onde plane polarisée

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \boldsymbol{\varepsilon}$$

interagit avec une cible constituée d'une vapeur d'atomes d'hydrogène. Dans l'état initial, l'atome cible est dans l'état fondamental

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | i \rangle = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$$

alors que dans l'état final, l'électron arraché à l'atome est dans un état de diffusion représenté asymptotiquement par une onde plane (normée dans un volume cubique  $L^3$ )

$$\varphi_f(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | f \rangle = L^{-3/2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Par définition de la section efficace différentielle de diffusion  $\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega}$ , celle-ci correspond à la surface équivalente ( $d^2\sigma$ ) qu'une cible parfaitement absorbante préleverait au faisceau incident,  $\langle \Pi_0 \rangle d\sigma$ , où  $\langle \Pi_0 \rangle$  est le vecteur de Poynting du faisceau incident moyenné sur le temps, pour absorber la même énergie par unité de temps que le processus envisagé  $\hbar\omega d^2\Gamma$ . On vérifie aisément que  $d^2\sigma = \hbar\omega d^2\Gamma / \langle \Pi_0 \rangle$  est bien homogène à une surface.

Le vecteur de Poynting moyenné sur le temps vaut simplement  $\langle \Pi_0 \rangle = \frac{1}{2}\varepsilon_0 c E_0^2$ . La densité d'états en énergie dans l'état final est donnée par

$$\rho(E_f, \Omega) = \frac{m|\mathbf{q}|}{(2\pi/L)^3 \hbar^2}.$$

L'expression de la section efficace différentielle de diffusion devient

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{m|\mathbf{q}|\omega}{\varepsilon_0 c E_0^2 \hbar^2} |W_{fi}|^2.$$

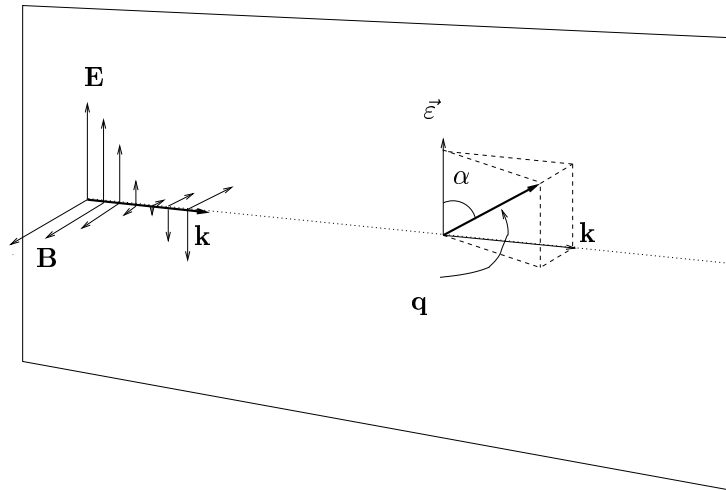
Dans l'approximation dipolaire électrique, pour le calcul de l'élément de matrice  $\langle f | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} | i \rangle$ , on peut mettre à profit le fait que  $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}$  est hermitien et peut donc agir sur  $|f\rangle$  qui est état propre de l'impulsion. On obtient l'intégrale ( $\zeta = 1/a_0$ )

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_0^\pi 2\pi r^2 dr \sin\theta' d\theta' e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}-r/a_0} &= -\frac{4\pi}{|\mathbf{q}|} \frac{\partial}{\partial\zeta} \int_0^\infty dr \sin|\mathbf{q}|r e^{-\zeta r} \\ &= \frac{8\pi a_0^3}{(1 + |\mathbf{q}|^2 a_0^2)^2}, \end{aligned}$$

d'où l'on déduit l'expression de la section efficace

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{32e^2}{mc\omega} \frac{|\mathbf{q}|^3 a_0^3}{(1 + |\mathbf{q}|^2 a_0^2)^4} \cos^2 \alpha$$

où l'on a  $\cos \alpha = \sin \theta \cos \varphi$  avec la convention habituelle où  $\theta$  repère la direction d'émission du photoélectron par rapport à la direction du faisceau lumineux incident, et  $\varphi$  mesure la rotation autour de la direction incidente). La probabilité d'émission des photo-électrons est maximale dans la direction de polarisation incidente.





## 26

# Traitement quantique de la diffusion élastique

### Termes d'interaction

Dans un processus de diffusion élastique, le système passe de l'état initial  $|i\rangle = |\varphi_i\rangle \otimes |n_{\mathbf{k}\lambda} 0_{\mathbf{k}'\lambda'}\rangle$  à un état final presque identique,  $|f\rangle = |\varphi_i\rangle \otimes |(n-1)_{\mathbf{k}\lambda} 1_{\mathbf{k}'\lambda'}\rangle$ . La partie champ en sortie est orthogonale à la partie champ en entrée car s'il y a eu diffusion, le vecteur d'onde a été modifié,  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ . Il faut donc avoir absorbé et créé un photon. Cela peut se faire au même instant, par un terme du type  $\hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$  en facteur d'une intégrale spatiale  $\langle \varphi_i | V(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle$ , ou alors en deux étapes distinctes, par des termes de la forme  $\langle \varphi_m | V(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$  puis  $\langle \varphi_i | V(\mathbf{r}) | \varphi_m \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger$ . Dans le premier cas il s'agit du terme diamagnétique, quadratique en opérateurs création et annihilation, traité au premier ordre en perturbation, alors que dans le second cas c'est le traitement du terme paramagnétique, linéaire en  $\hat{a}$  ou  $\hat{a}^\dagger$ , mais traité au second ordre en perturbation en sommant sur tous les états  $|\varphi_m\rangle$  intermédiaires.

### Diffusion Thomson

La diffusion élastique à haute énergie provient du terme diamagnétique. Rappelons tout d'abord l'expression de  $|\mathbf{A}(t=0)|^2$  dans l'approximation dipolaire électrique,

$$|\mathbf{A}(t=0)|^2 = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \left| \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \sum_{\mathbf{q}'} \sum_{\varepsilon'} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}'}}} \left[ \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^* \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^\dagger + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}'\varepsilon'} \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'} \right] \right|^2$$

On écrit alors le taux de transition comme

$$\frac{d^2\Gamma_{fi}^{\text{Thomson}}}{d^2\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{|q_e|^2}{2m} \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right) \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}'}^2}{\hbar c^3} \left| \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\varepsilon} \sum_{\mathbf{q}'} \sum_{\varepsilon'} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}'}}} \right. \\ \left. \left[ \langle \varphi_i | \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^* | \varphi_i \rangle \langle (n-1)_{\mathbf{k}\lambda} 1_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^\dagger | n_{\mathbf{k}\lambda} 0_{\mathbf{k}'\lambda'} \rangle \right. \right. \\ \left. \left. + \langle \varphi_i | \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\varepsilon}^* \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}'\varepsilon'} | \varphi_i \rangle \langle (n-1)_{\mathbf{k}\lambda} 1_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'} | n_{\mathbf{k}\lambda} 0_{\mathbf{k}'\lambda'} \rangle \right] \right|^2$$

Les éléments de matrice du champ sélectionnent  $\mathbf{q}'\varepsilon' = \mathbf{k}'\lambda'$  et  $\mathbf{q}\varepsilon = \mathbf{k}\lambda$  ou  $\mathbf{q}'\varepsilon' = \mathbf{k}\lambda$  et  $\mathbf{q}\varepsilon = \mathbf{k}'\lambda'$ . Le premier terme contribue par la première contrainte,  $\langle (n-1)_{\mathbf{k}\lambda} 1_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon} \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'}^\dagger | n_{\mathbf{k}\lambda} 0_{\mathbf{k}'\lambda'} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}} \sqrt{1_{\mathbf{k}'\lambda'}}$  alors que le second terme vaut  $\langle (n-1)_{\mathbf{k}\lambda} 1_{\mathbf{k}'\lambda'} | \hat{a}_{\mathbf{q}\varepsilon}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}'\varepsilon'} | n_{\mathbf{k}\lambda} 0_{\mathbf{k}'\lambda'} \rangle = \sqrt{1_{\mathbf{k}'\lambda'}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}}$ . Il vient finalement

$$\frac{d^2\Gamma_{fi}^{\text{Thomson}}}{d^2\Omega} = \frac{1}{64\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{|q_e|^4}{m c^2} \frac{1}{L^3} \omega_{\mathbf{k}}^2 4n_{\mathbf{k}\lambda} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'\lambda'}^*|^2 \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}'}}$$

d'où la section efficace différentielle de diffusion Thomson (résolue en polarisation en entrée et en sortie)

$$\frac{d^2\sigma_{fi}^{\text{Thomson}}}{d^2\Omega} = \frac{L^3}{n_{\mathbf{k}\lambda} c} \frac{d^2\Gamma_{fi}^{\text{Thomson}}}{d^2\Omega} \\ = r_0^2 \frac{\omega_{\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}}} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'\lambda'}^*|^2 \\ = r_0^2 \frac{\omega_{\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos^2 \Theta,$$

$\Theta$  étant l'angle entre les vecteurs polarisation en entrée et en sortie et  $\omega_{\mathbf{k}'} = \omega_{\mathbf{k}}$  pour la diffusion élastique. Il est remarquable de retrouver l'expression classique.

Dans le cas non polarisé on retrouve donc

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{\text{Thomson nonpol.}} = r_0^2 \overline{\cos^2 \Theta} = r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right)$$

et la section efficace totale par intégration sur les angles

$$\sigma_{\text{Thomson nonpol.}} = 2\pi \int_0^\pi r_0^2 \left( \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right) \sin \theta d\theta = \frac{8}{3} \pi r_0^2.$$

## 27

# Electrodynamique en cavité

On considère un atome unique placé dans une cavité optique permettant d'obtenir un champ électromagnétique monomode, c'est-à-dire tel que seul un mode  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  puisse être peuplé. Les opérateurs création et annihilation  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$  et  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$  se rapportant à ce mode seront simplement notés  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$ .

### Modèle de Jaynes-Cummings

L'hamiltonien atomique

$$H_{\text{at}} = |\varphi_b\rangle E_b \langle \varphi_b| + |\varphi_a\rangle E_a \langle \varphi_a|$$

dans la base  $\{|\varphi_b\rangle, |\varphi_a\rangle\}$ ,  $|\varphi_b\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $|\varphi_a\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  s'écrit

$$[H_{\text{at}}] = \begin{pmatrix} E_b & 0 \\ 0 & E_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E_b+E_a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{E_b+E_a}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{E_b-E_a}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{E_b-E_a}{2} \end{pmatrix}$$

$$H_{\text{at}} = \frac{1}{2}\hbar\Omega \mathbb{1} + \frac{1}{2}\hbar\omega_{ba} \sigma_z$$

avec  $\hbar\Omega = E_b + E_a$  et  $\hbar\omega_{ba} = E_b - E_a$ . Les états du champ sont de la forme  $|n\rangle$  où  $n = 0, 1, 2, \dots$  est le nombre (entier) de photons présents dans le mode. On a

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

L'hamiltonien du champ est de la forme

$$H_{\text{chp}} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}).$$

En négligeant le spin, en l'absence de potentiel scalaire associé à l'onde et en jauge de Coulomb, le terme d'interaction s'obtient en faisant la substitution

$$H_{\text{at}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0 \rightarrow \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + V_0 = H_{\text{at}} - \frac{q}{m}\mathbf{p}\mathbf{A} + \frac{q^2\mathbf{A}^2}{2m}.$$

Si on se limite au terme paramagnétique, on a

$$W(\mathbf{r}, t) = -\frac{q}{m}\mathbf{p}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{|q_e|}{m}\mathbf{p}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t),$$

et pour une onde polarisée suivant  $Oz$ ,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_z$ , ce qui conduit au terme  $\frac{|q_e|}{m}\hat{p}_z A(\mathbf{r}, t)$ . On peut exprimer

$$[z, H_{\text{at}}] = \frac{1}{2m}[z, \hat{p}_z^2] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_z$$

soit

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i | [z, H_{\text{at}}] | \varphi_j \rangle &= \frac{i\hbar}{m} \langle \varphi_i | \hat{p}_z | \varphi_j \rangle, \\ \langle \varphi_i | \hat{p}_z | \varphi_j \rangle &= im\omega_{ji} \langle \varphi_i | z | \varphi_j \rangle \end{aligned}$$

notamment, si  $i = j$  on a automatiquement  $\langle \varphi_i | \hat{p}_z | \varphi_i \rangle = 0$ . Seuls restent les éléments non diagonaux  $p_{ab}$  et  $p_{ba}$  qui doivent être égaux si ils sont réels (par hypothèse ici), puisque  $\hat{p}_z$  est hermitien. On a donc

$$\begin{aligned} [\hat{p}_z] &= \begin{pmatrix} 0 & p_{ab} \\ p_{ab} & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{p}_z &= p_{ab}(\sigma_+ + \sigma_-). \end{aligned}$$

Le potentiel vecteur dans une cavité métallique cubique  $L^3$  est de la forme

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{\hbar}{\varepsilon_0 L^3 \omega} \right)^{1/2} [\hat{a} + \hat{a}^\dagger] \cos(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t) \mathbf{u}_z.$$

En effet, comme il s'agit d'un mode unique, il n'y a pas à sommer sur les modes et comme le champ électrique doit s'annuler sur les parois, il ne peut pas comporter de terme en cos, soit

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\left( \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0 L^3} \right)^{1/2} [\hat{a} + \hat{a}^\dagger] \sin(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t) \mathbf{u}_z,$$

avec de plus une contrainte de quantification sur les  $\mathbf{q} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$ . Il vient finalement

$$W(\mathbf{r}, t) = \hbar g(\sigma_+ + \sigma_-) [\hat{a} + \hat{a}^\dagger] \cos(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)$$

avec  $\hbar g = \hbar \frac{|q_e|}{m} p_{ab} (\varepsilon_0 L^3 \omega \hbar)^{-1/2}$ . On vérifie les équations aux dimensions,  $[\varepsilon_0] = \mathbf{C}^2 \mathbf{M}^{-1} \mathbf{L}^{-3} \mathbf{T}^2$  et  $[\hbar] = \mathbf{M} \mathbf{L}^2 \mathbf{T}^{-1}$ , soit  $[g] = \mathbf{T}^{-1}$ .

Dans l'approximation dipolaire électrique,  $\lambda \gg a_0$ , soit  $|\mathbf{q}|a_0 \ll 1$  on peut remplacer  $\cos(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)$  par  $\cos(\omega t)$ . En représentation de Schrödinger, on fait  $t = 0$  ce qui conduit à l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \Omega \mathbb{1} + \frac{1}{2} \hbar \omega_{ba} \hat{\sigma}_z + \hbar \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) + \hbar g (\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) [\hat{a} + \hat{a}^\dagger].$$

En l'absence de terme d'interaction les niveaux d'énergie de  $H = \frac{1}{2} \hbar \Omega \mathbb{1} + \frac{1}{2} \hbar \omega_{ba} \hat{\sigma}_z + \hbar \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$  sont simplement

$$E_{b,a} = \frac{1}{2} \hbar \Omega \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_{ba} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega.$$

Dans la base  $\{|b, n\rangle, |a, n+1\rangle\}$  avec  $|b, n\rangle = |\varphi_b\rangle \otimes |n\rangle$  et  $|a, n+1\rangle = |\varphi_a\rangle \otimes |n+1\rangle$ , les matrices de Pauli agissent sur la partie spatiale, et les opérateurs  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$  sur la partie champ. l'opérateur  $\hat{\sigma}_+$  annihile le niveau le plus haut  $|\varphi_b\rangle$  et  $\hat{\sigma}_-$  annihile le plus bas,  $|\varphi_a\rangle$ . De même,  $\hat{a}^\dagger$  crée un photon et  $\hat{a}$  annihile un photon. Seuls deux mécanismes conservent l'énergie totale dans le terme d'interaction, ce sont  $\hat{\sigma}_+ \hat{a}$  et  $\hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger$ , il reste alors

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \Omega \mathbb{1} + \frac{1}{2} \hbar \omega_{ba} \hat{\sigma}_z + \hbar \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) + \hbar g (\hat{\sigma}_+ \hat{a} + \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger).$$

L'action des termes retenus dans l'interaction donne

$$\hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger |b, n\rangle = \sqrt{n+1} |a, n+1\rangle$$

$$\hat{\sigma}_+ \hat{a} |a, n+1\rangle = \sqrt{n+1} |b, n\rangle.$$

et l'hamiltonien complet est représenté par la matrice

$$[\hat{H}] = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \hbar (\Omega + \omega_{ba} + (n + \frac{1}{2}) \omega) & \hbar g \sqrt{n+1} \\ \hbar g \sqrt{n+1} & \frac{1}{2} \hbar (\Omega + \omega_{ba} - (n + \frac{3}{2}) \omega) \end{pmatrix},$$

que l'on peut encore écrire

$$[\hat{H}] = \Delta_n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \delta & 2g\sqrt{n+1} \\ 2g\sqrt{n+1} & -\delta \end{pmatrix},$$

avec  $\Delta_n = \frac{1}{2} \hbar \Omega + \hbar \omega (n+1)$  et  $\delta = \omega_{ba} - \omega$ . Les valeurs propres de  $\hat{H}$  sont données par  $E_{\pm, n} = \Delta_n + \frac{1}{2} \hbar \lambda_{\pm}$  où  $\lambda_{\pm}$  sont les valeurs propres de la dernière matrice et les vecteurs propres associés, que l'on notera  $|\pm, n\rangle$ , sont ceux de cette dernière matrice. Comme elle est de trace nulle ( $\lambda_+ + \lambda_- = 0$ ), le déterminant,  $-\delta^2 - 4g^2(n+1)$  vaut  $-\lambda_+^2$ , soit  $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{\delta^2 + 4g^2(n+1)}$ . Les vecteurs propres sont écrits de manière à être automatiquement normés et orthogonaux,

$$|+, n\rangle = \cos \theta_n |b, n\rangle + \sin \theta_n |a, n+1\rangle,$$

$$|-, n\rangle = -\sin \theta_n |b, n\rangle + \cos \theta_n |a, n+1\rangle,$$

soit par exemple

$$\begin{pmatrix} \delta & 2g\sqrt{n+1} \\ 2g\sqrt{n+1} & -\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_n \\ \sin \theta_n \end{pmatrix} = \lambda_+ \begin{pmatrix} \cos \theta_n \\ \sin \theta_n \end{pmatrix}$$

qui impose

$$\tan \theta_n = \frac{\sqrt{\delta^2 + 4g^2(n+1)} - \delta}{2g\sqrt{n+1}}.$$

Ces états sont appelés les états habillés de l'atome (ce sont les états propres du système atome + champ), par opposition aux états atomiques appelés états nus. On parle encore d'états intriqués ou non factorisables. Ils ont la particularité d'être totalement corrélés, c'est-à-dire qu'une mesure, même à grande distance (non localité), de l'état atomique renseigne immédiatement sur l'état du champ dans la cavité. A la résonance,  $\delta = 0$  et on a simplement  $\cos \theta_n = \sin \theta_n = \frac{1}{\sqrt{2}}$ .

### Emission spontanée en cavité, oscillations de Rabi, renaissance quantique

Si le système est initialement préparé dans un  $|\psi(0)\rangle$ , son évolution ultérieure est déterminée par la décomposition sur la base des états habillés (états propres),

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n'} (|+, n'\rangle \langle +, n' | \psi(0)\rangle + |-, n'\rangle \langle -, n' | \psi(0)\rangle),$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n'} (e^{-iE_{+,n'}t/\hbar} |+, n'\rangle \langle +, n' | \psi(0)\rangle + e^{-iE_{-,n'}t/\hbar} |-, n'\rangle \langle -, n' | \psi(0)\rangle).$$

Il est donc utile d'inverser les relations donnant les états habillés,

$$|b, n\rangle = \cos \theta_n |+, n\rangle - \sin \theta_n |-, n\rangle$$

$$|a, n+1\rangle = \sin \theta_n |+, n\rangle + \cos \theta_n |-, n\rangle$$

**Système préparé dans un état "nombre"** - Si le système est initialement dans un état atomique excité et dans un état "nombre" pour ce qui concerne le champ,  $|\psi(0)\rangle = |\varphi_b\rangle \otimes |n\rangle = |b, n\rangle$ , on obtient directement

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_{+,n}t/\hbar} |+, n\rangle \underbrace{\langle +, n | \psi(0)\rangle}_{\cos \theta_n} + e^{-iE_{-,n}t/\hbar} |-, n\rangle \underbrace{\langle -, n | \psi(0)\rangle}_{-\sin \theta_n}.$$

On en déduit les probabilités  $P_{b,n}(t) = |\langle b, n | \psi(t)\rangle|^2$  et  $P_{a,n+1}(t) = |\langle a, n+1 | \psi(t)\rangle|^2$ , soit tout d'abord les amplitudes et leurs modules,

$$\langle b, n | \psi(t)\rangle = e^{-i\Delta_n t/\hbar} (\cos^2 \theta_n e^{-i\lambda_+ t/2} + \sin^2 \theta_n e^{i\lambda_+ t/2})$$

$$|\langle b, n | \psi(t)\rangle| = \left| \cos\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right) - i \cos 2\theta_n \sin\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right) \right|$$

$$\langle a, n+1 | \psi(t)\rangle = e^{-i\Delta_n t/\hbar} (\cos \theta_n \sin \theta_n e^{-i\lambda_+ t/2} - \cos \theta_n \sin \theta_n e^{i\lambda_+ t/2})$$

$$|\langle a, n+1 | \psi(t)\rangle| = \sin(2\theta_n) \sin\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right)$$

puis les probabilités elles-mêmes,

$$P_{b,n}(t) = \cos^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right) + \cos^2(2\theta_n) \sin^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right),$$

$$P_{a,n+1}(t) = \sin^2(2\theta_n) \sin^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right).$$

On observe le phénomène connu sous le nom d'oscillations de Rabi, car les probabilités ci-dessus ont des comportements scillants non amortis. C'est très différent de la décroissance exponentielle que l'on obtiendrait dans le vide à partir de la cinétique de population de l'état excité,  $dN_b = -N_b A dt$ , avec  $A$  le coefficient d'Einstein de l'émission stimulée.

**Système préparé dans un état cohérent** - Si le champ est initialement dans un état cohérent  $\alpha$ , on a  $|\psi(0)\rangle = |\varphi_b\rangle \otimes |\alpha\rangle = |\varphi_b\rangle \otimes e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$  et la probabilité d'avoir au bout du temps  $t$  un atome dans l'état excité est une somme sur les probabilités conditionnelles  $P_{b,n}(t)$  pondérée par les probabilités  $\mathcal{P}_n$  d'avoir  $n$  photons dans l'état initial,

$$P_b(t) = \sum_n \mathcal{P}_n P_{b,n}(t) = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \left[ \cos^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right) + \cos^2(2\theta_n) \sin^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right) \right].$$

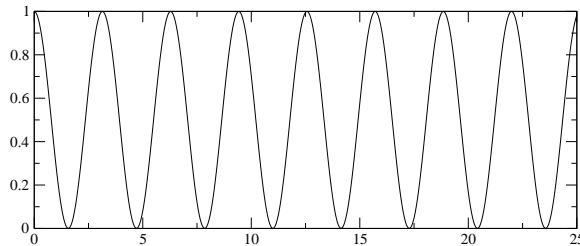
On a bien sûr de même

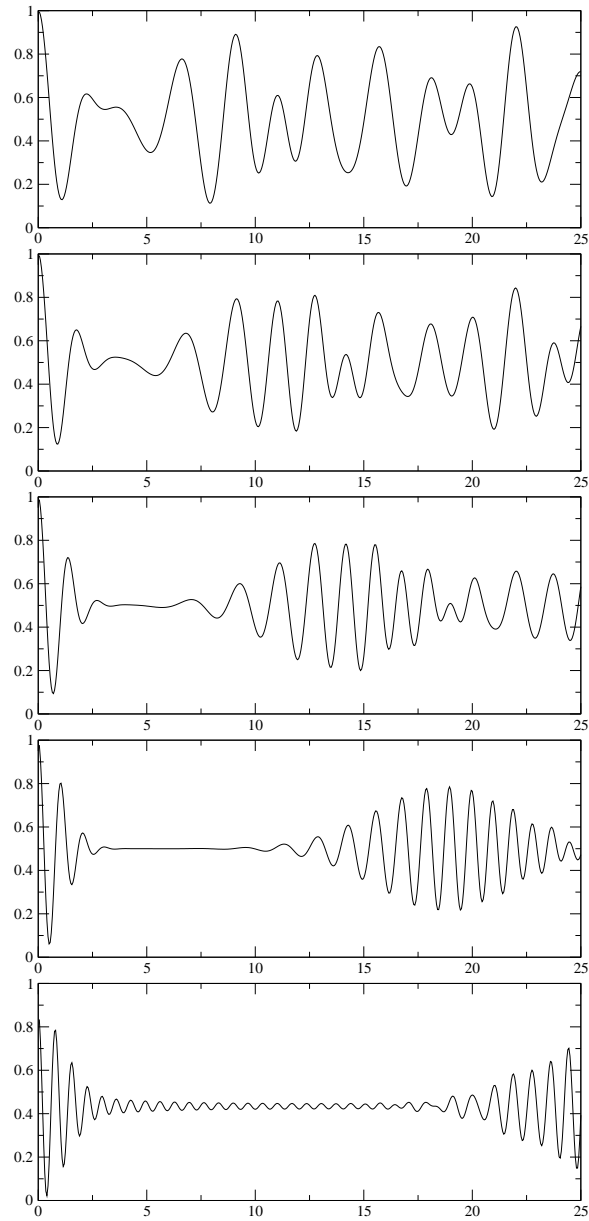
$$P_a(t) = \sum_n \mathcal{P}_n P_{a,n+1}(t) = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \sin^2(2\theta_n) \sin^2\left(\frac{\lambda_+ t}{2}\right).$$

Dans le cas particulier où la cavité est accordée sur la transition atomique (résonance),  $\delta = 0$  et il vient

$$P_b(t) = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cos^2(g\sqrt{n+1}t).$$

La figure suivante illustre cette fonction  $P_b(t)$  lorsque le système est préparé dans un état cohérent initial ayant 0, 1, 2, 4, 8 et 16 photons en moyenne ( $\bar{n} = |\alpha|^2$ ). On constate que les oscillations de Rabi s'estompent très rapidement (elles perdurent d'autant plus que le nombre de photons moyen est grand), mais surtout on voit apparaître le phénomène de renaissance quantique. En effet, l'état excité disparaît assez rapidement, mais au bout d'un certain temps, il réapparaît et de nouveau les oscillations de Rabi sont observables.





**Figure 1.** - Allure de  $P_b(t)$  en fonction de  $gt$  pour des états cohérents initiaux à 0, 1, 2, 4, 8 et 16 photons en moyenne.



## **Interactions électrons-atomes**

**158**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

## 28

# Diffusion classique de particules alpha par un atome

En 1909 Geiger et Marsden réalisent une expérience de diffusion de particules alpha par des atomes d'or. Ils utilisent pour cela un échantillon de radium émettant des particules alpha (noyaux d'hélium  ${}^4_2\text{He}$ ) d'énergie de l'ordre de  $E_\alpha \simeq 4 - 5$  MeV, qu'ils dirigent vers une feuille d'or très mince. Ils détectent ensuite à l'œil les traces fluorescentes laissées par les particules alpha sur des écrans de sulfure de zinc et obtiennent le nombre de particules déviées dans une direction  $(\theta, \varphi)$  donnée. Les résultats de ces expériences ont montré qu'une proportion anormalement élevée de particules alpha est diffusée aux grands angles, ils ont remis en cause le modèle de Thomson de l'atome et conduit au modèle de Rutherford en 1911.

### Diffusion particule $\alpha$ - atome de Thomson

Dans le modèle de Thomson de l'atome, les électrons (Thomson 1898) sont supposés baigner dans un "gellium" sphérique chargé positivement de façon uniforme (de charge totale  $+Z|q_e|$ ) et constituant l'essentiel de la masse de l'atome. Ce modèle conduit à des électrons liés élastiquement au sein de l'atome.

Le paramètre géométrique qui gouverne la diffusion est le paramètre d'impact  $b$ . Si celui-ci est supérieur au rayon typique de l'atome,  $R$  de l'ordre de l'Å, les électrons de l'atome écrantent totalement le potentiel dû au gellium et les particules chargées passent sans être déviées. Pour des valeurs de  $b$  inférieures à  $R$ , les particules incidentes interagissent d'une part avec le gellium, par un terme en

$$V_{\alpha+} \simeq 2|q_e|(A - Br^2)$$

(le potentiel dû au gellium est parabolique,  $\phi_+(r) = A - Br^2$ , avec  $2BR = E_+(R) = Z|q_e|/4\pi\epsilon_0 R^2$  et  $A = \frac{3}{2}\phi_+(R) = \frac{3}{2}\frac{Z|q_e|}{4\pi\epsilon_0 R}$ ) et d'autre part avec les électrons, dont la

distribution de charge  $\rho_-(\mathbf{r}) = -|q_e|n(\mathbf{r})$  a priori inconnue, crée un potentiel  $\phi_-(\mathbf{r})$  qui compense au moins partiellement celui du gellium. En définitive, l'interaction est atténuée par rapport à une interaction avec le gellium seul et on peut majorer l'intensité de cette interaction par un terme

$$E_{\text{int.}} = 2|q_e|A \simeq Ze^2/R = Z \frac{e^2}{a_0} \frac{a_0}{R} \simeq 10Z \text{ eV.}$$

Le rapport sans dimensions  $E_{\text{int.}}/E_\alpha$  est donc de l'ordre de  $10^{-5}Z$ . Sa valeur extrêmement faible laisse présager que la diffusion des particules  $\alpha$  incidentes sera négligeable, typiquement à des angles (quantité sans dimension) de l'ordre  $\theta_{\text{typ.}} \simeq E_{\text{int.}}/E_\alpha \simeq 10^{-4} \text{ rad} \simeq 10^{-2} \text{ degrés}$ . L'éventualité d'une rétrodiffusion, telle que l'on en observe expérimentalement, est donc impossible dans le cadre du modèle de Thomson.

### Diffusion particule $\alpha$ - atome de Rutherford

Pour rendre compte des événements à forte diffusion, Rutherford a été conduit à émettre l'hypothèse d'un atome constitué d'un noyau extrêmement petit, supposé ponctuel à l'échelle de l'atome, et entouré d'un cortège électronique situé à une distance typique mesurée par la taille de l'atome  $R$  de l'ordre de  $a_0$ . Lorsque l'on considère des particules  $\alpha$  diffusées par un tel modèle, si le paramètre d'impact  $b$  est de quelques  $\text{\AA}$ , le même écrantage que précédemment se produit et il n'y a aucune diffusion. Pour des valeurs de  $b$  de l'ordre de  $a_0$ , le problème dépend fortement des détails de la distribution électronique, mais dès que la facteur d'impact devient petit devant  $a_0$ , typiquement  $b \simeq 10^{-1}a_0$ , le nuage électronique est "externe" et le champ qu'il crée en un point interne est nul dès lors que la distribution électronique est à symétrie sphérique.

On est ainsi ramené dans le modèle de Rutherford à une diffusion nulle si  $b$  est plus grand que la taille de l'atome, et à une diffusion par un noyau ponctuel positif seul dès que  $b$  est plus petit que la taille de l'atome. Ce qui est alors essentiel, c'est que la diffusion significative sera produite par une interaction purement coulombienne,

$$V_{\text{int.}}(r) = \frac{2Ze^2}{r},$$

et que celle-ci est non bornée. Quelle que soit l'énergie  $E_\alpha$  des particules incidentes, il existera toujours un paramètre d'impact  $b$  qui assure une diffusion à des angles de l'ordre de l'unité,

$$f(\theta = O(1)) = \frac{2Ze^2}{b} \frac{1}{E_\alpha}$$

soit un angle de diffusion de l'ordre de 115 degrés si  $b$  atteint des valeurs aussi petites que  $b/a_0 = (2Ze^2/a_0)/E_\alpha \simeq 0.001$ . Evidemment la fonction sans dimension  $f(\theta)$  reste inconnue.

Dans le cas simplifié de la diffusion à haute énergie on peut faire un calcul approché très simple. L'angle de diffusion restant très faible, on a

$$\tan \theta \simeq \theta = \frac{p_\perp}{p_\parallel}$$

où  $p_{\parallel} \simeq p_0 = mv_0$  et  $p_{\perp}$  représente le transfert d'impulsion au cours de la collision,

$$p_{\perp} = \int_{-\infty}^{+\infty} F_{\perp} dt = \frac{2|q_e|}{v_0} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} E_{\perp} dz}_{Z|q_e|/2\pi b\epsilon_0}$$

et la dernière intégrale est donnée par le théorème de Gauss appliqué à un cylindre de longueur infinie et dont le rayon est fixé par le paramètre d'impact  $b$ . On a donc

$$\theta \simeq \frac{2Ze^2}{bE}.$$

On en déduit la section efficace différentielle dans la limite d'une faible déflexion ( $\theta$  petit),

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \simeq \frac{b}{\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \left( \frac{2Ze^2}{E} \right)^2 \theta^{-4}.$$

Un calcul exact donne

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{2Ze^2}{bmv_0^2}.$$

En effet Les lois de conservation de l'énergie et du moment cinétique s'écrivent

$$|\mathbf{L}| = mr^2\dot{\varphi} = mv_0b,$$

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + V(r) + \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{1}{2}mv_0^2.$$

A l'aide de la première on exprime  $\dot{\varphi}$  que l'on injecte dans la seconde pour tirer

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} = \pm \frac{L}{mr^2} \left[ \frac{2}{m} \left( E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{-1/2}.$$

Appliquée au potentiel coulombien et à l'aide des notations suivantes,  $\epsilon = \frac{2Ze^2}{bmv_0^2}$  et  $u = (\epsilon + b/r)/\sqrt{1 + \epsilon^2}$ , on en déduit  $d\varphi = du/\sqrt{1 - u^2}$ , ou encore  $\varphi(r) = \text{Arcsin}u(r)$ . L'angle de diffusion vaut  $\theta = \pi - 2\alpha$  avec  $\alpha$  l'angle entre la direction d'où sont issues les particules et la distance minimale d'approche  $r_0$ , soit  $\alpha = \varphi(r_0) - \varphi(\infty) = \frac{\pi}{2} - \text{Arcsin} \frac{\epsilon}{\sqrt{1 + \epsilon^2}}$ . On a  $\theta = 2\text{Arcsin} \frac{\epsilon}{\sqrt{1 + \epsilon^2}}$  que l'on écrit plutôt sous la forme

$$\tan \frac{\theta}{2} = \epsilon = \frac{2Ze^2}{bmv_0^2}.$$

L'expression exacte de la section efficace différentielle qui en résulte,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \left( \frac{2Ze^2}{E} \right)^2 \frac{1}{(2 \sin \frac{\theta}{2})^4},$$

est singulière aux petits angles. On a négligé l'écrantage du noyau par le nuage électronique, phénomène qui limite la section efficace différentielle quand  $\theta \rightarrow 0$ . Cela provient du fait que lorsque le paramètre d'impact augmente (et devient de l'ordre de  $a_0$ ), le potentiel coulombien dû au noyau est écranté par le nuage électronique, ce qui diminue d'autant la diffusion. De même, la taille finie du noyau limite la diffusion aux grands angles et la loi en  $\sin^{-4} \theta/2$  correspond à la limite du noyau ponctuel.

**162**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

## 29

# Diffusion élastique des électrons par un atome

### Diffusion élastique des électrons à haute énergie

L'approximation de Born donne la section efficace différentielle de diffusion en fonction de la transformée de Fourier du potentiel d'interaction particules incidentes-cible,

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\tilde{V}(\mathbf{q})|^2.$$

L'interaction des électrons incidents avec le noyau et les électrons de l'atome est décrite par

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= -|q_e|\phi(\mathbf{r}) \\ \Delta V(\mathbf{r}) &= 4\pi e^2(Z\delta(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})). \end{aligned}$$

On utilise ensuite les propriétés des transformées de Fourier,  $\mathcal{F}(\Delta V(\mathbf{r})) = -|\mathbf{q}|^2\tilde{V}(\mathbf{q})$ ,  $\mathcal{F}(\delta(\mathbf{r})) = 1$ , de sorte que

$$-|\mathbf{q}|^2\tilde{V}(\mathbf{q}) = 4\pi Ze^2 - 4\pi e^2\tilde{n}(\mathbf{q}),$$

où

$$\tilde{n}(\mathbf{q}) = \int d^3r n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

et donc dans l'approximation de Born,

$$\begin{aligned}\frac{d^2 f}{d^2 \Omega} &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{q}) \\ &= \frac{2me^2}{\hbar^2 |\mathbf{q}|^2} (Z - \tilde{n}(\mathbf{q})).\end{aligned}$$

La section efficace différentielle varie en

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} \sim (a_0 |\mathbf{q}|^2)^{-2}$$

conformément à la diffusion de Rutherford.

Aux petits angles, c'est-à-dire dans la limite  $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ , puisque  $|\mathbf{q}| = 2|\mathbf{k}| \sin \theta/2$ ,

$$\tilde{n}(\mathbf{q}) \simeq Z - \frac{1}{6} Z |\mathbf{q}|^2 \langle r^2 \rangle$$

de sorte que

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} = \frac{Z^2 \langle r^2 \rangle^2}{9a_0^2}.$$

La valeur de  $\langle r^2 \rangle^2$  peut être comparée aux mesures de susceptibilité diamagnétique. En effet pour un atome sous champ,

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q\mathbf{p}\mathbf{A}}{m} + \frac{q^2 \mathbf{A}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

en jauge de Coulomb. Le terme en  $\mathbf{A}^2$  est le terme diamagnétique qui produit un décalage en énergie de  $\Delta E_{dia} = \langle \psi | q^2 \mathbf{A}^2 / 2m | \psi \rangle$  avec  $|\mathbf{A}| = \frac{1}{2} B \rho$  si  $\mathbf{B}$  est uniforme, soit

$$\Delta E_{dia} = \frac{q^2 B^2}{2m} \langle \psi | \rho^2 | \psi \rangle = \frac{q^2 B^2}{12m} \langle r^2 \rangle = - \int_0^B \mu(B') B' dB',$$

qui correspond à un moment magnétique élémentaire  $\mu(B) = -\frac{q^2 \langle r^2 \rangle}{6m} B$ , soit une susceptibilité

$$\chi_{dia} = N \mu_0 \frac{d\mu}{dB} = -\frac{N \mu_0 q^2 \langle r^2 \rangle}{6m}.$$

Dans l'approximation de Thomas-Fermi notamment on a

$$\begin{aligned}\langle r^2 \rangle &= 22 Z^{-2/3} a_0^2, \\ \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} &= 54 Z^{2/3} a_0^2.\end{aligned}$$



**Traitement quantique de la densité électronique**

Dans l'approche précédente, la densité électronique  $n(\mathbf{r})$  est supposée provenir d'une approche semi-classique, la méthode de Thomas-Fermi par exemple. Si l'on procède à un traitement quantique <sup>(42)</sup>, on suppose connues les fonctions d'onde de l'atome à  $Z$  électrons et on est amené à définir une densité ("monoparticule") effective  $n(\mathbf{r})$  qui joue un rôle analogue à la quantité correspondante introduite au paragraphe précédent. La fonction d'onde totale

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z | \varphi_n \rangle = \varphi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z),$$

dont la normation est assurée par

$$1 = \int |\varphi_n(\dots)|^2 \prod_i d^3 r_i,$$

doit être antisymétrique par échange d'électrons, de sorte que son module au carré est inchangé. L'intégration sur toutes les coordonnées  $\mathbf{r}_i \neq \mathbf{r}_j$  donne la densité de probabilité de présence du jème électron,

$$n(\mathbf{r}_j) = Z \int |\varphi_n(\dots)|^2 \prod_{i \neq j} d^3 r_i,$$

$$Z = \int d^3 r_j n(\mathbf{r}_j).$$

On en déduit que dans  $n(\mathbf{r}_j)$  la variable  $\mathbf{r}_j$  est muette et qu'en fait on pourrait écrire  $n(\mathbf{r}_j) = n(\mathbf{r})$ .

Un faisceau d'électrons incidents d'énergie positive  $\hbar^2 |\mathbf{k}|^2 / 2m$ , repéré par  $\mathbf{R}$  et modélisé par une onde plane

$$\langle \mathbf{R} | \mathbf{k} \rangle = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

interagit avec le noyau et les électrons de l'atome, de sorte que

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{R}|} + \sum_{j=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|}.$$

On se propose d'effectuer ici le calcul par l'intermédiaire de la règle d'or de Fermi, avec un état initial et un état final qui ne diffèrent que par la direction du vecteur d'onde de l'électron incident et diffusé,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Gamma_{fi}}{d^2 \Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \left( \frac{d^3 n}{dE d^2 \Omega} \right)_{E_f}, \\ E_i &= E_n + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}, \quad E_f = E_n + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}'|^2}{2m}, \\ |i\rangle &= |\mathbf{k}\rangle \otimes |\varphi_n\rangle, \quad |f\rangle = |\mathbf{k}'\rangle \otimes |\varphi_n\rangle. \end{aligned}$$

<sup>(42)</sup> H.A. Bethe and R. Jackiw, *Intermediate quantum mechanics*, Westview Press, Boulder 1997.

La partie délicate à traiter réside dans le calcul de l'élément de matrice

$$\begin{aligned}\langle f|V|i\rangle &= L^{-3} \int d^3R \left[ \int \prod_{j=1}^Z d^3r_j \varphi_n^*(\dots) V(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \varphi_n(\dots) \right] e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \\ &= L^{-3} \int d^3R F(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}.\end{aligned}$$

avec  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ . La fonction  $F(\mathbf{R})$  est donnée par

$$F(\mathbf{R}) = \left[ \int \prod_{j=1}^Z d^3r_j \varphi_n^*(\dots) V(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \varphi_n(\dots) \right].$$

Pour évaluer l'intégrale sur  $\mathbf{R}$ , on utilise l'identité

$$\int d^3R F(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = -\frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \int d^3R (\vec{\nabla}^2 F(\mathbf{R})) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}$$

et dans  $\vec{\nabla}^2 F(\mathbf{R})$  (laplacien par rapport aux coordonnées de  $\mathbf{R}$ ) il apparaît

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2 V(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) &= Ze^2 \vec{\nabla}_{\mathbf{R}}^2 \left( \frac{-1}{|\mathbf{R}|} \right) + e^2 \sum_j \vec{\nabla}_{\mathbf{R}}^2 \left( \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \right) \\ &= 4\pi e^2 [Z\delta(\mathbf{R}) - \sum_j \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)].\end{aligned}$$

On peut ensuite réaliser l'intégration sur la position de l'électron incident,

$$\begin{aligned}-\frac{L^{-3}}{|\mathbf{q}|^2} \int d^3R \vec{\nabla}^2 F(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} &= -\frac{L^{-3}}{|\mathbf{q}|^2} \int d^3R \int \prod_{j=1}^Z d^3r_j \\ &\quad \varphi_n^*(\dots) \vec{\nabla}^2 V(\mathbf{R}, \dots) \varphi_n(\dots) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \\ &= -\frac{L^{-3}}{|\mathbf{q}|^2} \int d^3R \int \prod_{j=1}^Z d^3r_j \varphi_n^*(\dots) 4\pi e^2 [Z\delta(\mathbf{R}) \\ &\quad - \sum_j \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)] \varphi_n(\dots) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \\ &= \text{par intégration sur } \mathbf{R} \\ &= -\frac{L^{-3}}{|\mathbf{q}|^2} 4\pi e^2 \int \prod_{j=1}^Z d^3r_j \varphi_n^*(\dots) (Z - \sum_j e^{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j}) \varphi_n(\dots)\end{aligned}$$

L'intégrale s'écrit

$$Z - \sum_{j=1}^Z \int d^3 r_j \underbrace{\left[ \int \prod_{i \neq j}^Z d^3 r_i |\varphi_n(\dots)|^2 \right]}_{Z^{-1} n(\mathbf{r}_j)} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$$

c'est-à-dire

$$Z - \frac{1}{Z} \sum_{j=1}^Z \int d^3 r_j n(\mathbf{r}_j) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} = Z - \tilde{n}(\mathbf{q})$$

et il vient finalement pour l'élément de matrice

$$\langle f|V|i \rangle = -L^{-3} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q}|^2} (Z - \tilde{n}(\mathbf{q})).$$

Pour achever le calcul, il faut encore exprimer la densité d'états,

$$\frac{d^3 n}{dE d^2 \Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|^2 d|\mathbf{k}'| d^2 \Omega}{(2\pi/L)^3 dE d^2 \Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|}{(2\pi/L)^3} \frac{m}{\hbar^2}$$

en utilisant  $\frac{dE}{d|\mathbf{k}'|} = \frac{\hbar^2}{m} |\mathbf{k}'|$ . La section efficace différentielle obtenue est

$$\frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} = J_0^{-1} \frac{d^2 \Gamma_{fi}}{d^2 \Omega},$$

soit avec  $J_0 = (\hbar |\mathbf{k}|/m) L^{-3}$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} &= \frac{m}{\hbar |\mathbf{k}|} L^3 \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\mathbf{k}'|}{(2\pi/L)^3} \frac{m}{\hbar^2} |\langle f|V|i \rangle|^2 \\ &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} L^6 \frac{16\pi^2 e^4}{|\mathbf{q}|^4} L^{-6} |Z - \tilde{n}(\mathbf{q})|^2 \\ &= \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4 |\mathbf{q}|^4} |Z - \tilde{n}(\mathbf{q})|^2. \end{aligned}$$

On retrouve le même résultat que par l'approche plus élémentaire. Le point le plus important ici est d'avoir donné un sens à la densité électronique (et à sa transformée de Fourier) à partir de la fonction d'onde multiélectronique.

### Limite de l'approche haute énergie

La section efficace différentielle à haute énergie admet une variation monotone décroissante en fonction de l'angle de diffusion  $\theta$  qui correspond à peu près à la réalité, mais un désaccord manifeste apparaît aux grands angles où un comportement oscillant est visible dans les résultats expérimentaux. Aux grands angles, l'approximation de haute énergie cesse d'être justifiée et ce comportement

est dû au rôle joué par les déphasages. Si la distribution électronique est à symétrie sphérique, on sait que l'on peut utiliser la méthode *exacte* des ondes partielles et l'amplitude différentielle de diffusion s'écrit de manière exacte sous la forme

$$\frac{d^2 f}{d^2 \Omega} = \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta).$$

On a vu que l'approximation de Born pouvait alors s'écrire sous la forme

$$\left( \frac{d^2 f}{d^2 \Omega} \right)_{\text{Born}} \simeq \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) \zeta_l P_l(\cos \theta)$$

où les  $\zeta_l$  sont les approximants de Born de  $e^{i\delta_l} \sin \delta_l$ , déterminés par orthogonalisation,

$$\begin{aligned} \zeta_l &= \frac{1}{2} k \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) \left( \frac{d^2 f}{d^2 \Omega} \right)_{\text{Born}} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{2} k \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r dr V(r) \sin qr, \end{aligned}$$

On en déduit l'apparition d'une structure oscillante dans l'approximation de Born en fonction de l'angle de diffusion,

$$\frac{d^2 f}{d^2 \Omega} \simeq \frac{1}{k} (\zeta_0 + 3\zeta_1 \cos \theta + \frac{5}{2}\zeta_2(\cos^2 \theta - 1) + \dots).$$

Cette structure apparaît dans le cas où la limite haute énergie n'est plus valable. Traitons par exemple l'effet du potentiel constant sphérique en partant de la limite des petits angles quand  $q \rightarrow \infty$ , on a

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi}{q} \int_0^a r dr V_0 \left( qr - \frac{1}{6} q^3 r^3 + \dots \right) \\ &= \frac{4\pi}{q} V_0 \left( \frac{1}{3} qa^3 - \frac{1}{30} q^3 a^5 + \dots \right) \\ &= \frac{4\pi}{3} V_0 a^3 \left( 1 - \frac{1}{10} q^2 a^2 + \dots \right), \end{aligned}$$

$$\zeta_l = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{2} k \frac{4\pi}{3} V_0 a^3 \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) \left( 1 - \frac{1}{10} 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} a^2 + \dots \right).$$

Le premier terme donne directement  $\int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) = 2\delta_{l,0}$  et le second se développe en  $\frac{1}{10} a^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) 2k^2 (1 - \cos \theta) = \frac{1}{5} k^2 a^2 (2\delta_{l,0} - \frac{2}{3}\delta_{l,1})$ . Au total il vient à cet ordre du développement de  $\sin qr$

$$\zeta_l = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{3} V_0 k a^3 \left( \delta_{l,0} - \frac{1}{5} k^2 a^2 (\delta_{l,0} - \frac{1}{3}\delta_{l,1}) \right)$$

et les déphasage  $\zeta_0$  et  $\zeta_1$  sont non nuls et valent

$$\zeta_0 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{3} V_0 k a^3 \left( 1 - \frac{1}{5} k^2 a^2 \right),$$

$$\zeta_1 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{3} V_0 k a^3 \frac{1}{15} k^2 a^2,$$

mais dans la limite de haute énergie où seul  $\zeta_0$  intervient, il n'y a pas d'oscillation observable.

**170**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

## 30

# Rayonnement de freinage

Le rayonnement de freinage, ou Bremsstrahlung, résulte de l'émission de rayonnement électromagnétique par une particule chargée lorsqu'elle est accélérée. De tels mécanismes interviennent notamment lors de la diffusion de particules chargées, puisqu'au cours des collisions, le transfert d'impulsion donne lieu à une accélération. On considère généralement le cas simplifié où l'une des charges reste immobile (particule cible assimilée à un noyau) et seule la particule chargée incidente rayonne.

### Interactions photon-électron libre

On peut distinguer plusieurs types d'interactions entre photons et électrons (diffusion, émission, absorption). Les mécanismes de diffusion photon-électron concernent le cas de photons incidents interagissant avec des électrons de sorte que dans l'état final on retrouve le photon diffusé dans une nouvelle direction, éventuellement à la même fréquence (diffusion élastique à haute fréquence (Thomson) sur un électron libre ou à basse fréquence (Rayleigh) sur un électron lié) ou à une fréquence différente (diffusion inélastique à haute énergie (Compton) sur un électron libre). Les mécanismes d'absorption et d'émission sont des mécanismes d'interaction inélastique au cours desquels la nature (le nombre en l'occurrence) des particules a changé au cours du processus. Il est cependant impossible qu'un tel processus d'absorption ou d'émission de photons se produise avec des électrons libres. Supposons le contraire : on considère le cas d'un électron libre, d'énergie-impulsion  $p_1^\mu = (E_1/c, \mathbf{p}_1)$ . On suppose qu'il émet un photon  $P^\mu = (E/c, \mathbf{P})$  et se retrouve dans l'état final  $p_2^\mu = (E_2/c, \mathbf{p}_2)$ . On note  $\theta$  l'angle entre  $\mathbf{P}$  et  $\mathbf{p}_2$  après émission. On a  $p_{1\mu}p_1^\mu = p_{2\mu}p_2^\mu + P_\mu P^\mu + 2p_{2\mu}P^\mu$ , soit

$$m^2 c^2 = m^2 c^2 + 0 + 2|\mathbf{p}_2||\mathbf{P}| \cos \theta - 2E_2 E/c^2.$$

Cette égalité est impossible si l'on tient compte de l'inégalité stricte  $E_2 E/c^2 > |\mathbf{p}_2||\mathbf{P}|$  (car  $E_2 = \sqrt{|\mathbf{p}_2|^2 c^2 + m^2 c^4} > |\mathbf{p}_2|c$  et  $E = |\mathbf{P}|c$ ). Un électron libre se

déplaçant dans le vide ne peut donc en aucun cas émettre un photon. En inversant les rôles de  $p_1^\mu$  et de  $p_2^\mu$ , on conclut de même qu'un électron libre ne peut pas absorber de photon. Pour pouvoir absorber ou émettre des photons, il faut que l'électron interagisse avec la matière ou qu'il soit lié par un potentiel comme dans l'atome. C'est ce potentiel externe qui encaisse la transfert d'impulsion nécessaire à la création ou à l'absorption du photon.

### Calcul classique de l'émission de rayonnement par une particule chargée diffusée

La contribution dominante (non relativiste) au champ électrique rayonné dans la direction  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  par une particule chargée ( $q = z|q_e|$ ) accélérée s'écrit

$$\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{a})}{rc^2}$$

en négligeant l'effet de retard (les quantités doivent être en principe estimées à l'instant retardé  $t - r/c$ ). En introduisant le vecteur unitaire de polarisation  $\hat{\mathbf{e}}$ , le module du champ

$$|\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t)| = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{|\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{e}}|}{rc^2}$$

permet d'exprimer la puissance instantanée dans l'angle solide  $d^2\Omega$ ,

$$\begin{aligned} d^2P_R(t) &= r^2 d^2\Omega |\boldsymbol{\pi}_R| \\ &= r^2 d^2\Omega \epsilon_0 c |\mathbf{E}_R(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &= \frac{z^2 e^2}{4\pi c^3} |\mathbf{a}(t) \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2 d^2\Omega. \end{aligned}$$

On en déduit l'énergie perdue par rayonnement au cours de la diffusion,

$$\frac{d^2W}{d^2\Omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\mathbf{w}(t)|^2 dt$$

si la puissance instantanée est notée  $d^2P_R(t) = |\mathbf{w}(t)|^2$ .

Introduisons la transformée de Fourier  $\tilde{\mathbf{w}}(\omega)$  de  $\mathbf{w}(t)$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{w}}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{w}(t) e^{i\omega t} dt, \\ \mathbf{w}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathbf{w}}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \end{aligned}$$

l'énergie dissipée devient

$$\begin{aligned} \frac{d^2W}{d^2\Omega} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \tilde{\mathbf{w}}^*(\omega') \tilde{\mathbf{w}}(\omega) e^{i(\omega' - \omega)t} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \tilde{\mathbf{w}}^*(\omega') \tilde{\mathbf{w}}(\omega) \delta(\omega - \omega') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\tilde{\mathbf{w}}(\omega)|^2 \end{aligned}$$



où l'on a utilisé la représentation intégrale de  $\delta$ ,

$$\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega' - \omega)t}.$$

Nous avons en fait utilisé l'identité de Parseval qui relie l'intégrale sur la variable d'origine à l'intégrale sur la variable de Fourier. Appelons  $\frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega}$  la probabilité d'émission (d'un photon) par unité de fréquence dans l'angle solide élémentaire, on a

$$\frac{d^2W}{d^2\Omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\tilde{\mathbf{w}}(\omega)|^2 = \hbar\omega \int_0^{+\infty} \frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} d\omega,$$

soit  $\frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} = |\tilde{\mathbf{w}}(\omega)|^2 + |\tilde{\mathbf{w}}(-\omega)|^2$  et comme  $\mathbf{w}(t)$  est réel,  $\tilde{\mathbf{w}}(-\omega) = \tilde{\mathbf{w}}^*(\omega)$  de sorte que finalement

$$\begin{aligned} \frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} &= \frac{2}{\hbar\omega} |\tilde{\mathbf{w}}(\omega)|^2 \\ &= \frac{2}{\hbar\omega} \frac{z^2 e^2}{4\pi c^3} |\tilde{\mathbf{a}}(\omega) \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2. \end{aligned}$$

Dans la limite des basses fréquences, le mode de Fourier  $\omega \rightarrow 0$  de l'accélération s'évalue facilement,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{a}}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{a}(t) e^{i\omega t} dt \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{a}(t) dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi m}} (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) \end{aligned}$$

où  $\mathbf{p}_1$  et  $\mathbf{p}_2$  représentent l'impulsion de la particule incidente avant et après la choc. On obtient finalement le taux de probabilité d'émission d'un photon par unité de fréquence et d'angle solide

$$\frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} = \frac{z^2 e^2}{4\pi^2 m^2 c^3 \hbar\omega} |(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2.$$

On introduit la notation suivante pour le transfert d'impulsion,

$$\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$$

de sorte que l'on écrit encore

$$\frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} = \frac{z^2 e^2 \hbar}{4\pi^2 m^2 c^3 \omega} |\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2.$$

La section efficace de rayonnement de freinage s'obtient en multipliant le taux de probabilité précédent par la section efficace différentielle de diffusion Rutherford,

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega_2}\right)_c = \left(\frac{zZe^2}{E}\right)^2 \frac{1}{(2\sin\frac{\theta_2}{2})^4} = (2zZme^2/\hbar^2)^2 |\mathbf{q}|^{-4},$$

qui exprime la probabilité d'obtenir (à énergie incidente  $E_2 = \frac{1}{2}mv_0^2$  fixée) un transfert d'impulsion  $\hbar\mathbf{q}$  lors de la collision ( $\theta_2$  mesure l'angle de diffusion de la particule chargée et l'indice  $_c$  est pour coulombien). On a ainsi

$$\begin{aligned} \frac{d^5\sigma}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2} &= \frac{d^3\mathcal{P}}{d\omega d^2\Omega} \left(\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega_2}\right)_c \\ &= \frac{z^2 e^2 \hbar}{4\pi^2 m^2 c^3 \omega} |\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2 (2zZme^2/\hbar^2)^2 |\mathbf{q}|^{-4} \\ &= \frac{z^4 Z^2 e^6}{\pi^2 \hbar^3 c^3 \omega} \frac{|\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2}{|\mathbf{q}|^4}. \end{aligned}$$

### Traitement quantique du Bremsstrahlung

Le traitement quantique du rayonnement de freinage résulte de la probabilité que la particule incidente passe d'un état quantique à un autre état quantique avec émission d'un photon pendant l'interaction avec le potentiel coulombien. On considère ainsi la transition d'un état initial où la particule incidente est dans un état propre de l'impulsion  $|\mathbf{p}_1\rangle$  en présence de l'état du vide pour les photons,  $|0\rangle$ , vers un état final qui est également une onde plane pour la partie spatiale,  $|\mathbf{p}_2\rangle$ , et le champ est peuplé d'un photon  $|1_{\mathbf{k}\epsilon}\rangle$  dans le mode  $\mathbf{k}\epsilon$ , soit encore

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |\mathbf{p}_1\rangle \otimes |0\rangle, & \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_1 \rangle &= L^{-3/2} e^{i\mathbf{p}_1 \mathbf{r} / \hbar}, \\ |f\rangle &= |\mathbf{p}_2\rangle \otimes |1_{\mathbf{k}\epsilon}\rangle, & \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_2 \rangle &= L^{-3/2} e^{i\mathbf{p}_2 \mathbf{r} / \hbar}. \end{aligned}$$

La diffusion coulombienne sous l'effet du potentiel d'interaction  $V(\mathbf{r}) = zZe^2/r$  est incapable de rendre compte de l'émission d'un photon car ce potentiel seul est indépendant du champ et ne peut donc pas coupler des états distincts du champ. Il faut donc faire appel à l'interaction de la charge incidente  $z|q_e|$  avec le champ produit par les fluctuations du vide. On rappelle qu'en représentation de Schrödinger, le potentiel vecteur est donné par le développement

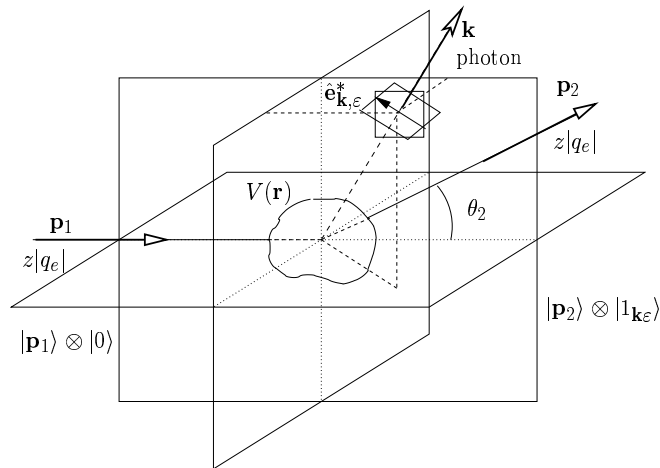
$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_{\kappa} L^3}} \left( a_{\kappa\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda} e^{i\kappa\mathbf{r}} + a_{\kappa\lambda}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda}^* e^{-i\kappa\mathbf{r}} \right).$$

Dans l'approximation dipolaire,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \simeq \mathbf{A}(0)$ , et le champ électrique est alors donné par

$$\mathbf{E}(0) = \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\kappa}}{2\epsilon_0 L^3}} i \left( a_{\kappa\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda} - a_{\kappa\lambda}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda}^* \right).$$

Sous l'effet de ce champ (constant et uniforme à l'échelle de la particule), la charge  $z|q_e|$  voit sa position déplacée de  $\mathbf{r}$  à  $\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}$  où en première approximation (formalisme de Fierz-Pauli) on a  $\frac{d^2\boldsymbol{\rho}}{dt^2} = \frac{z|q_e|}{m}\mathbf{E}(0)$ , soit  $\boldsymbol{\rho} \simeq \frac{z|q_e|}{m\omega^2}\mathbf{E}(0)$ , ou en généralisant,

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{z|q_e|}{m} \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\kappa}^3 L^3}} i \left( a_{\kappa\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda} - a_{\kappa\lambda}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda}^* \right).$$



La règle d'or de Fermi donne alors le taux de transition d'où découle la section efficace différentielle associée au processus <sup>(43)</sup>,

$$\frac{d^5\sigma_{fi}}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2} = \frac{mL^3}{|\mathbf{p}_1|} \frac{d^5\Gamma_{fi}}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2},$$

$$\frac{d^5\Gamma_{fi}}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\epsilon} | V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) | \mathbf{p}_1, 0 \rangle|^2 \frac{d^3n_{\gamma}}{d\omega d^2\Omega} \frac{d^3n_z}{dE_2 d^2\Omega_2}.$$

La densité d'états dans l'état final fait apparaître d'une part la densité d'états résolue en angle et en énergie associée aux particules chargées diffusées (dans  $d^2\Omega_2$ ),

$$\frac{d^3n_z}{dE_2 d^2\Omega_2} = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{m|\mathbf{p}_2|}{\hbar^3},$$

et d'autre part la densité d'états résolue en angle et en fréquence associée aux photons (émis dans  $d^2\Omega$ ),

$$\frac{d^3n_{\gamma}}{d\omega d^2\Omega} = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{c^3}.$$

<sup>(43)</sup> On rappelle que  $\frac{d^2\Gamma}{d^2\Omega}$  est un taux de transition, homogène à l'inverse d'un temps et donc que la quantité  $\frac{d^5\Gamma_{fi}}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2}$  est sans dimension.

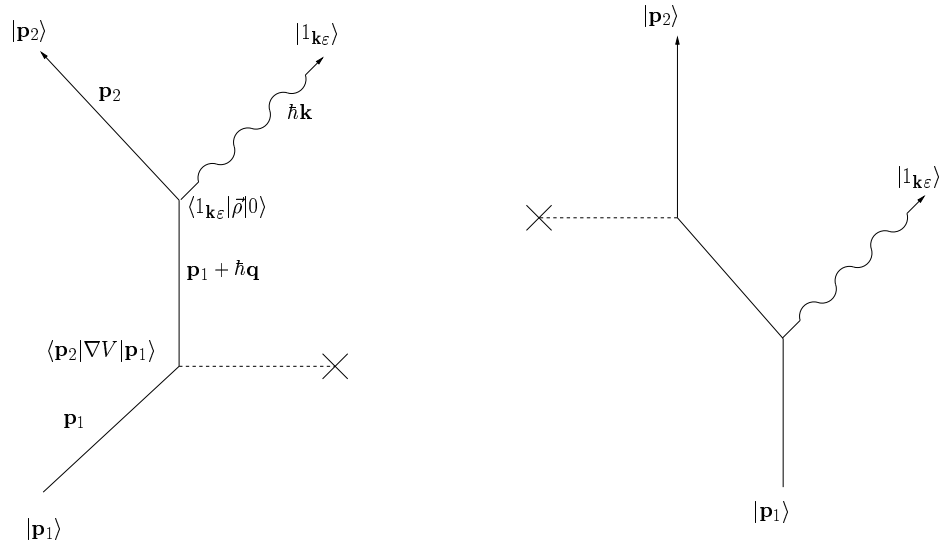
Il suffit ensuite de développer le potentiel en série de Taylor, les termes en  $\rho$  agissant sur les états du champ et les dérivées du potentiel jouent sur les états de la particule. En nous limitant au premier ordre,

$$V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \simeq V(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\rho} \vec{\nabla} V$$

et l'élément de matrice donne

$$\langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\varepsilon} | V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) | \mathbf{p}_1, 0 \rangle \simeq \langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\varepsilon} | \boldsymbol{\rho} \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1, 0 \rangle$$

car  $V(\mathbf{r})$  comme on l'a vu n'a que des éléments de matrice nuls entre de tels états.



En développant l'élément de matrice tel qu'il est illustré sur la figure ci-dessus, il vient

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\varepsilon} | \boldsymbol{\rho} \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1, 0 \rangle &= \langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\varepsilon} | \frac{z|q_e|}{m} \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\kappa}^3 L^3}} i a_{\kappa\lambda}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda}^* \cdot \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1, 0 \rangle \\ &= i \frac{z|q_e|}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \omega_{\kappa}^{-3/2} \langle \mathbf{p}_2, 1_{\mathbf{k}\varepsilon} | a_{\kappa\lambda}^{\dagger} \hat{\mathbf{e}}_{\kappa\lambda}^* \cdot \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1, 0 \rangle \\ &= i \frac{z|q_e|}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \omega_{\mathbf{k}}^{-3/2} \langle \mathbf{p}_2 | \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\varepsilon}^* \cdot \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1 \rangle \\ &= i \frac{z|q_e|}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}} \omega_{\mathbf{k}}^{-3/2} L^{-3} (-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\varepsilon}^*) \tilde{V}(\mathbf{q}) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé l'identité

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{p}_2 | \vec{\nabla} V | \mathbf{p}_1 \rangle &= L^{-3} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \vec{\nabla} V(\mathbf{r}) \\
 &= L^{-3} (-i\mathbf{q}) \int d^3q e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\
 &= L^{-3} (-i\mathbf{q}) \tilde{V}(\mathbf{q})
 \end{aligned}$$

avec  $\tilde{V}(\mathbf{q})$  la transformée de Fourier du potentiel,

$$\tilde{V}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2} zZe^2.$$

Il vient finalement pour la section efficace différentielle de rayonnement de freinage

$$\begin{aligned}
 \frac{d^5\sigma_{fi}}{d\omega d^2\Omega d^2\Omega_2} &= \frac{mL^3}{|\mathbf{p}_1|} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{z^2|q_e|^2}{m^2} \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}^3} \frac{1}{L^6} |\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\varepsilon}^*|^2 \\
 &\quad \times \frac{16\pi^2}{|\mathbf{q}|^4} z^2 Z^2 e^4 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m|\mathbf{p}_2|}{\hbar^3} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{c^3} \\
 &= \frac{z^4 Z^2 e^6}{\pi^2 \hbar^3 \omega c^3} \frac{|\mathbf{p}_2|}{|\mathbf{p}_1|} \frac{|\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\varepsilon}^*|^2}{|\mathbf{q}|^4},
 \end{aligned}$$

ce qui est correct sur le plan dimensionnel, car la combinaison  $e^6/\hbar^3 c^3 = \alpha^3$  est sans dimension. Par ailleurs, la diffusion étant élastique,  $\frac{|\mathbf{p}_2|}{|\mathbf{p}_1|} = 1$  et l'on retrouve le même résultat que par le calcul classique.

**178**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*

## 31

# Diffusion dépendant du spin

Lorsque l'on tient compte de l'existence du spin et notamment du couplage spin-orbite, il faut modifier l'approche développée précédemment. Cela peut se faire au moyen de la méthode des ondes partielles aussi bien que dans le cadre de l'approximation de Born <sup>(44)</sup>.

### Harmoniques sphériques généralisés

Lorsque l'on couple le moment cinétique  $\mathbf{L}$  à un spin  $\frac{1}{2}$ , les valeurs de  $j$  (liées au moment cinétique total  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ) peuvent prendre les valeurs  $l + \frac{1}{2}$  ou  $l - \frac{1}{2}$ . Dans le changement de base entre les états  $|l j m\rangle$  et les états  $|l m_l m_s\rangle$ , on introduit donc deux coefficients de Clebsch-Gordan,

$$|l j m\rangle = A_{\uparrow} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle + A_{\downarrow} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle.$$

Pour déterminer ces coefficients, on peut par exemple faire agir sur la combinaison linéaire ci-dessus l'opérateur  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) = L_z S_z + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+)$ . On introduit les notations

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l j m\rangle = a_{jl} |l j m\rangle,$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle = b_{m\uparrow} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle + c_{lm} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle,$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle = b_{m\downarrow} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle + c_{lm} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle,$$

<sup>(44)</sup> H. Friedrich, *Theoretical atomic physics*, Springer, Berlin 1991, p. 207, R. Omnès, *Introduction à l'étude des particules élémentaires*, Edisciences, Paris 1970, p. 150, H.A. Bethe and R. Jackiw, *Intermediate quantum mechanics*, Westview Press, Boulder 1997, p. 281.

avec <sup>(45)</sup>  $a_{jl} = \frac{1}{2}(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})$ , soit, selon que  $l = j \mp \frac{1}{2}$ ,

$$a_{j, j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(j - \frac{1}{2}), \quad a_{j, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}(j + \frac{3}{2}),$$

$$b_{m\uparrow} = \frac{1}{2}(m - \frac{1}{2}), \quad b_{m\downarrow} = -\frac{1}{2}(m + \frac{1}{2}),$$

$$c_{lm} = \frac{1}{2}\sqrt{l(l+1) - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2})}.$$

On en déduit l'égalité

$$a_{jl} |l j m\rangle = (A_{\uparrow} b_{m\uparrow} + A_{\downarrow} c_{lm}) |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle + (A_{\uparrow} c_{lm} + A_{\downarrow} b_{m\downarrow}) |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle.$$

Il s'ensuit finalement

$$(A_{\uparrow} b_{m\uparrow} + A_{\downarrow} c_{lm}) = A_{\uparrow} a_{jl}$$

$$(A_{\uparrow} c_{lm} + A_{\downarrow} b_{m\downarrow}) = A_{\downarrow} a_{jl}.$$

La résolution (avec normation) donne

$$A_{\uparrow} = \frac{1}{N} c_{lm}, \quad A_{\downarrow} = \frac{1}{N} (a_{jl} - b_{m\uparrow}), \quad N^2 = c_{lm}^2 + (a_{jl} - b_{m\uparrow})^2,$$

soit de manière explicite,

- si  $j = l + \frac{1}{2}$

$$|l j m\rangle = \sqrt{\frac{j+m}{2j}} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{j-m}{2j}} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle.$$

- si  $j = l - \frac{1}{2}$

$$|l j m\rangle = -\sqrt{\frac{j-m+1}{2(j+1)}} |l m - \frac{1}{2} \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{j+m+1}{2(j+1)}} |l m + \frac{1}{2} \downarrow\rangle.$$

Plutôt que  $|l j m\rangle$ , on introduit maintenant la notation de Dirac  $|\mathbf{Y}_{ljm}\rangle$  et  $\mathbf{Y}_{ljm} = \begin{pmatrix} \langle \theta, \varphi, \uparrow | \mathbf{Y}_{ljm} \rangle \\ \langle \theta, \varphi, \downarrow | \mathbf{Y}_{ljm} \rangle \end{pmatrix}$  pour les spineurs à deux composantes permettant d'écrire les combinaisons linéaires précédentes sous la forme d'harmoniques sphériques généralisés (on indique ici explicitement la valeur de  $j$  en fonction de  $l$ ),

$$\mathbf{Y}_{l, l+\frac{1}{2}, m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{Y}_{l, l-\frac{1}{2}, m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

<sup>(45)</sup> On omet les facteurs  $\hbar^2$  qui devraient intervenir dans tous les coefficients et donc finalement se simplifier.



Les spineurs de Pauli à deux composantes sont particulièrement utiles pour la description des propriétés des électrons (spin  $\frac{1}{2}$ ). Dans le cas d'un atome, en tenant compte du couplage spin-orbite  $\zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , l'hamiltonien à un électron  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) + \zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  agissant sur un spineur de la forme

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} f_{jl}(r) \mathbf{Y}_{ljm}(\theta, \varphi),$$

ou encore  $\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ , avec  $\psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \uparrow | \boldsymbol{\psi} \rangle$  et  $\psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \downarrow | \boldsymbol{\psi} \rangle$  conduit par exemple à

$$\zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}|\boldsymbol{\psi}\rangle = \frac{1}{r}\zeta_{LS}(r)f_{jl}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}|\mathbf{Y}_{ljm}\rangle = \frac{1}{r}\zeta_{LS}(r)f_{jl}(r)a_{jl}|\mathbf{Y}_{ljm}\rangle$$

c'est-à-dire à l'équation aux valeurs propres

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) + \frac{1}{2}\hbar^2 F(j, l)\zeta_{LS}(r) \right) f_{jl}(r) = E f_{jl}(r)$$

avec  $F(j, l) = l$  ou  $-(l+1)$  selon que  $j = l + \frac{1}{2}$  ou  $j = l - \frac{1}{2}$ .

### Introduction des déphasages pour la diffusion de particules de spin $\frac{1}{2}$ sur une cible sans spin

Rappelons l'ingrédient essentiel de la méthode des ondes partielles. Partant du développement de l'onde plane sur la base des harmoniques sphériques <sup>(46)</sup>,

$$e^{i\mathbf{k}r \cos \theta} = \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) = \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_l^0(\theta),$$

et de la décomposition de la fonction de Bessel sphérique  $j_l(kr) = \frac{1}{2}(h_l^+(kr) + h_l^-(kr))$ , on écrit que la fonction d'onde en présence du potentiel diffuseur, mais au-delà de la portée de ce potentiel s'écrit simplement comme l'onde plane dont la partie sortante est déphasée, soit

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(r, \theta) &= \sum_l \frac{1}{2} (2l+1) i^l (e^{2i\delta_l} h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) P_l(\cos \theta) \\ &= \sum_l \frac{1}{2} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l (e^{2i\delta_l} h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) Y_l^0(\theta). \end{aligned}$$

Par définition de l'amplitude de diffusion  $A_{\mathbf{k}}(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta) = \sum_l F_l Y_l^0(\theta)$ , on a aussi

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(r, \theta) &=_{r \rightarrow \infty} \sum_l [(2l+1) i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r}] P_l(\cos \theta) \\ &=_{r \rightarrow \infty} \sum_l [\sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) + F_l \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r}] Y_l^0(\cos \theta). \end{aligned}$$

<sup>(46)</sup> On rappelle que  $P_l(\cos \theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^0(\theta)$ . On écrit ici toutes les expressions voulues sur la base des polynômes de Legendre et sur celle des harmoniques sphériques, plus commode pour traiter les particules de spin  $\frac{1}{2}$ .

L'expression de l'amplitude de diffusion résulte de l'identification de ces deux dernières équations dans la limite  $kr \gg 1$ , en faisant usage du comportement asymptotique  $h_l^+(kr) \sim_{kr \gg 1} -i \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{kr} = i^{-l-1} \frac{e^{ikr}}{kr}$ , soit

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} &= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l \underbrace{\frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1)}_{f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l} P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l \underbrace{\frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1)}_{F_l = \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l} Y_l^0(\theta). \end{aligned}$$

Pour traiter la diffusion dépendant du spin, il faut commencer par exprimer le développement de l'onde plane polarisée  $\varphi_{\mathbf{k}} = e^{ikz} \chi$ , où  $\chi$  est un état quelconque de l'espace des spins, par exemple  $e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , sur les harmoniques sphériques généralisés.

Pour un faisceau incident polarisé  $\uparrow$  atteignant une cible non polarisée, la projection du moment total  $m = \frac{1}{2}$  est conservée et impose les harmoniques sphériques généralisés suivants (on rappelle que la composante haute d'un spineur est associée à  $\uparrow$  et que la composante basse correspond à  $\downarrow$ )

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{ll+\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} Y_l^0 \\ \sqrt{l} Y_l^1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{Y}_{ll-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l} Y_l^0 \\ \sqrt{l+1} Y_l^1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

En inversant ces relations, on obtient

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} Y_l^0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll+\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - \sqrt{\frac{l}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \\ \begin{pmatrix} 0 \\ Y_l^1 \end{pmatrix} &= \sqrt{\frac{l}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll+\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

L'onde plane incidente polarisée  $\uparrow$  se développe alors comme

$$\begin{aligned} e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) \begin{pmatrix} Y_l^0(\theta) \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) \left[ \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll+\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - \sqrt{\frac{l}{2l+1}} \mathbf{Y}_{ll-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right] \\ &= \sum_l \frac{1}{2} \sqrt{4\pi} i^l [\sqrt{l+1} (h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) \mathbf{Y}_{ll+\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - \sqrt{l} (h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) \mathbf{Y}_{ll-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}]. \end{aligned}$$

Après interaction avec le potentiel, l'onde diffusée (sous forme d'un spineur à deux composantes) s'écrit en introduisant des déphasages spécifiques à chacun des deux canaux,  $\delta_l^+$  et  $\delta_l^-$  pour  $j = l + \frac{1}{2}$  et  $j = l - \frac{1}{2}$ , pour les parties ondes sortantes uniquement, soit

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(r, \theta, \varphi) = \sum_l \frac{1}{2} \sqrt{4\pi} i^l [\sqrt{l+1} (e^{2i\delta_l^+} h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) \mathbf{Y}_{l, l+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \\ - \sqrt{l} (e^{2i\delta_l^-} h_l^+(kr) + h_l^-(kr)) \mathbf{Y}_{l, l-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}]. \end{aligned}$$

L'identification avec la forme asymptotique

$$\psi_{\mathbf{k}}(r, \theta, \varphi) =_{kr \gg 1} e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{e^{ikr}}{r} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \\ B_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

permet d'exprimer les deux composantes de l'amplitude de diffusion,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}} \\ B_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} &= \sum_l \frac{\sqrt{4\pi}}{2ik} [\sqrt{l+1} (e^{2i\delta_l^+} - 1) \mathbf{Y}_{l, l+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - \sqrt{l} (e^{2i\delta_l^-} - 1) \mathbf{Y}_{l, l-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}] \\ &= \sum_l \frac{\sqrt{4\pi}}{2ik} \left[ \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} (e^{2i\delta_l^+} - 1) \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} Y_l^0 \\ \sqrt{l} Y_l^1 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{l}{2l+1}} (e^{2i\delta_l^-} - 1) \begin{pmatrix} -\sqrt{l} Y_l^0 \\ \sqrt{l+1} Y_l^1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_l \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \begin{pmatrix} [(l+1)(e^{2i\delta_l^+} - 1) + l(e^{2i\delta_l^-} - 1)] Y_l^0 \\ \sqrt{l(l+1)} (e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-}) Y_l^1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

On peut encore poser pour simplifier l'écriture

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) &= \sum_l F_l Y_l^0(\theta), \\ B_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) &= \sum_l G_l Y_l^1(\theta, \varphi), \end{aligned}$$

où les amplitudes de diffusion partielles sont données par

$$\begin{aligned} F_l &= \frac{1}{2ik} \sqrt{4\pi} \left[ \frac{l+1}{\sqrt{2l+1}} (e^{2i\delta_l^+} - 1) + \frac{l}{\sqrt{2l+1}} (e^{2i\delta_l^-} - 1) \right] \\ G_l &= \frac{1}{2ik} \sqrt{4\pi} \sqrt{\frac{l(l+1)}{2l+1}} (e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-}). \end{aligned}$$

On constate que si les déphasages sont indépendants de la valeur de  $j$ , à  $l$  donné, l'amplitude de diffusion avec retournement du spin,  $B_{\mathbf{k}}(\Omega)$ , est nulle, car tous les

$G_l$  sont nuls et pour l'amplitude de diffusion cohérente, on retrouve le résultat  $F_l = \frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1)$  du cas de particules incidentes sans spin. C'est une manifestation du fait que si l'interaction cible-particule incidente est indépendante du spin,  $\mathbf{S}$  se conserve (c'est-à-dire  $S^2$  et  $S_z$ ) et l'amplitude de retournement du spin est nécessairement nulle. Dans le cas où l'interaction dépend du spin, c'est  $\mathbf{J}$  qui est conservé comme on l'a indiqué en préambule et la conservation de  $m$  autorise néanmoins le retournement du spin du projectile. Ce type d'amplitude de diffusion avec retournement du spin (spin flip amplitude) donne accès expérimentalement aux interactions magnétiques, dépendantes de  $\mathbf{S}$ .

On peut reproduire un raisonnement en tout point analogue dans le cas d'une polarisation initiale  $\downarrow$  du faisceau incident. On cherche cette fois une forme asymptotique du spineur diffusé sous la forme

$$\psi'_{\mathbf{k}}(r, \theta, \varphi) =_{kr \gg 1} e^{ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{e^{ikr}}{r} \begin{pmatrix} A'_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \\ B'_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

et le calcul conduit à

$$B'_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) = \sum_l F_l Y_l^0(\theta),$$

$$A'_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) = - \sum_l G_l Y_l^{-1}(\theta, \varphi),$$

où les amplitudes de diffusion partielles sont données par les mêmes expressions que dans le premier cas (on a notamment  $B'_{\mathbf{k}} = A_{\mathbf{k}}$  et  $A'_{\mathbf{k}} = -B_{\mathbf{k}}^*$ ).

Le cas général se traite à partir de ces deux cas particuliers. Pour une polarisation incidente arbitraire  $|\chi\rangle$ , l'onde initiale  $e^{ikz}|\chi\rangle$  devient asymptotiquement après diffusion

$$e^{ikz}|\chi\rangle + \frac{e^{ikr}}{r} F(\theta, \varphi)|\chi\rangle,$$

avec la matrice <sup>(47)</sup> de diffusion  $F(\theta, \varphi)$  qui est une matrice  $2 \times 2$

$$F(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}(\Omega) & -B_{\mathbf{k}}^*(\Omega) \\ B_{\mathbf{k}}(\Omega) & A_{\mathbf{k}}(\Omega) \end{pmatrix}.$$

Pour une polarisation incidente  $\alpha$ , la section efficace différentielle de diffusion conduisant en sortie à des particules de spin  $\beta$  est donnée par

$$\frac{d^2\sigma_{\alpha \rightarrow \beta}}{d^2\Omega} = |\langle \beta | F(\theta, \varphi) | \alpha \rangle|^2.$$

<sup>(47)</sup> Attention, le terme matrice de diffusion est ici employé abusivement, car on appelle en général "scattering matrix" un objet différent.

Si l'on ne mesure pas la polarisation en sortie et que l'on envoie un faisceau initial également non polarisé, on a (le préfacteur  $\frac{1}{2}$  provient de la moyenne sur deux polarisations équiprobables)

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{n.p.}}{d^2\Omega} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\langle \beta | F(\theta, \varphi) | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(F^\dagger F) \\ &= |A_{\mathbf{k}}(\Omega)|^2 + |B_{\mathbf{k}}(\Omega)|^2. \end{aligned}$$

### Approximation de Born pour des particules incidentes de spin $\frac{1}{2}$

L'intérêt pour développer le formalisme de l'approximation de Born dépendant du spin est manifeste lorsque l'on considère un potentiel d'interaction particule incidente - cible comprenant par exemple une partie de couplage spin-orbite,  $V(\mathbf{r}) + \zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ . On suppose que la partie spatiale de l'interaction spin-orbite est purement radiale. L'approximation de Born usuelle donne

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'},$$

que l'on ré-écrit ici pour des besoins de simplification de notation sous la forme

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \simeq \langle \mathbf{r} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \langle \varphi_{\mathbf{k}'} | U(\mathbf{r}) | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle.$$

Avec une onde incidente sous la forme d'un spineur à deux composantes, on remplace  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  par  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}|\chi\rangle$  et l'onde diffusée prend la forme

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|\chi\rangle - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \langle \varphi_{\mathbf{k}'} | V(\mathbf{r}) + \zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle |\chi\rangle,$$

ou, sous forme plus explicite,

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}|\chi\rangle - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} [V(\mathbf{r}') + \zeta_{LS}(r')\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} |\chi\rangle \\ = e^{ikz}|\chi\rangle + \frac{e^{ikr}}{r} F(\theta, \varphi) |\chi\rangle. \end{aligned}$$

Il faut cette fois considérer des spineurs (partie spin uniquement) incident et diffusé  $|\chi\rangle$  et  $|\chi'\rangle$ . Il vient deux contributions à la matrice de diffusion, tout d'abord le terme habituel  $-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{q})$ , ensuite le terme dû au couplage spin-orbite que l'on peut développer

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}'} \chi' | \zeta_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \varphi_{\mathbf{k}} \chi \rangle &= -i\hbar \langle \varphi_{\mathbf{k}'} \chi' | \zeta_{LS}(r)(\mathbf{r} \wedge \nabla) \cdot \mathbf{S} | \varphi_{\mathbf{k}} \chi \rangle \\ &= -i\hbar \langle \varphi_{\mathbf{k}'} \chi' | \zeta_{LS}(r)(\mathbf{r} \wedge i\mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} | \varphi_{\mathbf{k}} \chi \rangle, \end{aligned}$$

or,  $\int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \zeta_{LS}(r) \mathbf{r} \wedge \mathbf{k} = i \frac{\partial \tilde{\zeta}_{LS}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \wedge \mathbf{k} = i \frac{\partial \tilde{\zeta}_{LS}(\mathbf{q})}{\partial q} \frac{\mathbf{q}}{q} \wedge \mathbf{k}$  de sorte qu'il vient au total

$$F(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{q}) \mathbb{1} - i \frac{m}{2\pi\hbar q} \frac{\partial \tilde{\zeta}_{LS}(\mathbf{q})}{\partial q} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | (\mathbf{k}' \wedge \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | (\mathbf{k}' \wedge \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | (\mathbf{k}' \wedge \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | (\mathbf{k}' \wedge \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} | \downarrow \rangle \end{pmatrix}.$$

On note que  $\zeta_{LS}$  est homogène à une énergie divisée par  $\hbar^2$ , ce qui permet de vérifier les dimensions de l'expression ci-dessus.

## **Interactions neutrons-atomes**

**188**

*Mis à jour le 11 Septembre 2007*



## 32

# Interactions neutrons-atomes

### Le pseudo-potentiel de Fermi

Les neutrons sont des particules de spin  $\frac{1}{2}$ . Dans une expérience de diffusion des neutrons par une cible, on note  $|\mathbf{k}\sigma\rangle$  l'onde plane incidente des neutrons,  $\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = L^{-3/2}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , d'impulsion  $\hbar\mathbf{k}$  et de spin  $\sigma$  et  $|\lambda\rangle$  l'état de la cible d'énergie  $E_\lambda$ . En l'absence de champ magnétique externe, l'énergie des neutrons incidents  $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2|\mathbf{k}|^2/2m_n$  est indépendante du spin  $\sigma$ . Le taux de transition entre un état combiné de la cible et des neutrons,  $|i\rangle = |\mathbf{k}\sigma\lambda\rangle = |\mathbf{k}\sigma\rangle \otimes |\lambda\rangle$ , et  $|f\rangle = |\mathbf{k}'\sigma'\lambda'\rangle = |\mathbf{k}'\sigma'\rangle \otimes |\lambda'\rangle$  est donné par la règle d'or de Fermi,

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | U | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle|^2 \left( \frac{dn}{dE} \right)_{E_{\mathbf{k}'} + E_{\lambda'} = E_{\mathbf{k}} + E_{\lambda}}.$$

Le potentiel d'interaction neutrons-cible reste à préciser. Dans la pratique on est intéressé par les transitions entre états des neutrons,  $|\mathbf{k}\sigma\rangle \rightarrow |\mathbf{k}'\sigma'\rangle$ , quel que soit l'état de la cible. C'est réalisé en sommant sur les états finals et sur les états initiaux pondérés par leurs probabilités,

$$\Gamma_{\mathbf{k}\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma'} = \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \Gamma_{\mathbf{k}\sigma\lambda \rightarrow \mathbf{k}'\sigma'\lambda'}.$$

Si la cible est à l'équilibre thermique, ce qui est généralement le cas,  $p_\lambda = Z^{-1} \exp(-\beta E_\lambda)$  dans l'ensemble canonique et  $p_\lambda = \Xi^{-1} \exp[-\beta(E_\lambda - \mu N_\lambda)]$  dans l'ensemble grand canonique ( $N_\lambda$  est alors le nombre de particules cible dans l'état  $|\lambda\rangle$  et  $\mu$  leur potentiel chimique).

La section efficace différentielle vaut alors

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} &= \frac{L^3 m_n}{\hbar |\mathbf{k}|} \frac{d^2\Gamma_{\mathbf{k}\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma'}}{d^2\Omega} \frac{|\mathbf{k}'| m_n L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3} \\ &= \frac{L^6 m_n^2 |\mathbf{k}'|}{(2\pi\hbar^2)^2 |\mathbf{k}|} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda |\langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | U | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle|^2. \end{aligned}$$

Si la mesure du faisceau de neutrons en entrée et en sortie n'est pas résolue en spin, on doit encore sommer sur les états  $\sigma$  et  $\sigma'$ .

Il s'agit maintenant de se donner la forme de l'interaction neutrons-cible. Les neutrons thermiques utilisés pour les expériences de diffusion à l'échelle atomique ont des longueurs d'onde de l'ordre de l'Å. La portée des interactions nucléaires est de l'ordre de la taille du noyau,  $10^{-15}\text{m}$ , de sorte que l'interaction neutron atome peut être considérée comme ponctuelle et représentée par le pseudo-potentiel de Fermi,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} b \delta(\mathbf{r}).$$

Le facteur  $b$  est appelé longueur de diffusion. Il dépend du noyau et de sa nature isotopique. Si le noyau possède un spin,  $b$  doit être compris comme un opérateur dépendant des états combinés de spin du noyau et du neutron. Dans un premier temps on ignore cette subtilité. Aux échelles pertinentes en matière condensée, la diffusion par un noyau est élastique car les énergies des neutrons thermiques (de l'ordre de l'eV) sont incapables d'exciter des états nucléaires pour lesquels les transitions sont dans le MeV. Compte-tenu de la forme ponctuelle du pseudo-potentiel de Fermi, les éléments de matrice impliqués dans la règle d'or se simplifient,  $\langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | \delta(\mathbf{r}) | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\lambda\lambda'}$ . La section efficace différentielle de diffusion élastique par un noyau vaut alors  $d^2\sigma/d^2\Omega = b^2$ . Elle est isotrope.

Pour une cible constituée d'un ensemble d'atomes  $\alpha$  aux positions  $\mathbf{r}_\alpha$ , le potentiel d'interaction peut s'écrire comme

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}).$$

L'élément de matrice vaut cette fois

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \delta_{\sigma\sigma'} \int d^3r \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) | \lambda \rangle \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \langle \lambda' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) | \lambda \rangle \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \langle \lambda' | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}} | \lambda \rangle \end{aligned}$$

On passe à une intégrale sur le temps en utilisant la représentation intégrale de delta (la conservation de l'énergie est toujours implicite),

$$\delta(E_{\lambda'} - E_{\lambda} - \hbar\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(t-t')}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\lambda'} - E_{\lambda} - \hbar\omega)(t-t')}.$$

Il vient

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|}{2\pi\hbar|\mathbf{k}|} \sum_{\lambda\lambda'} \int dt e^{i\omega(t-t')} p_{\lambda} \sum_{\alpha\alpha'} \langle \lambda' | b_{\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} | \lambda \rangle \langle \lambda | b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} | \lambda' \rangle.$$

Les états de la cible forment une base,  $\sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda| = \mathbb{1}$ , et par définition, la moyenne à l'équilibre pour une observable de la cible  $O$  vaut

$$\langle O \rangle = \sum_{\lambda} p_{\lambda} \langle \lambda | O | \lambda \rangle.$$

Il vient alors

$$\frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} = \frac{|\mathbf{k}'|}{2\pi\hbar|\mathbf{k}|} \int dt e^{i\omega(t-t')} \left\langle \sum_{\alpha\alpha'} b_{\alpha} b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \right\rangle.$$

### Diffusion cohérente et incohérente

Dans la moyenne d'équilibre  $\langle \sum_{\alpha\alpha'} b_{\alpha} b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \rangle$ , le degré de liberté  $\alpha$  précisant l'espèce isotopique du noyau à la position  $\mathbf{r}_{\alpha}(t)$  est indépendant des degrés de liberté dynamiques, de sorte que l'on peut factoriser les moyennes et écrire  $\sum_{\alpha\alpha'} \overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \rangle$  avec  $\overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}}$  la moyenne sur une distribution binaire par exemple dans le cas où deux isotopes sont présents dans le matériau, soit  $P(\alpha) = p_1\delta(\alpha - \alpha_1) + p_2\delta(\alpha - \alpha_2)$ , avec  $p_1 + p_2 = 1$ . Dans ces conditions, si  $\alpha = \alpha'$ ,  $\overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}}$  se réduit à  $\overline{b_{\alpha}^2} = p_1 b_1^2 + p_2 b_2^2$ , alors que si  $\alpha \neq \alpha'$ ,  $\overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}}$  vaut  $p_1 b_1 p_2 b_2 + p_2 b_2 p_1 b_1$ . Il vient donc

$$\begin{aligned} \overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}} &= \overline{b_{\alpha}^2} \delta_{\alpha, \alpha'} + \overline{b_{\alpha} b_{\alpha'}} (1 - \delta_{\alpha, \alpha'}) \\ &= (\overline{b_{\alpha}^2} - \overline{b_{\alpha}}^2) \delta_{\alpha, \alpha'} + \overline{b_{\alpha}}^2 \end{aligned}$$

et finalement

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{\alpha\alpha'} b_{\alpha} b_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \right\rangle &= \underbrace{(\overline{b_{\alpha}^2} - \overline{b_{\alpha}}^2)}_{\sigma_{incoh.}/4\pi} \sum_{\alpha} \left\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t')} \right\rangle \\ &\quad + \underbrace{\overline{b_{\alpha}}^2}_{\sigma_{coh.}/4\pi} \sum_{\alpha, \alpha'} \left\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \right\rangle. \end{aligned}$$

Le premier terme correspond à la section efficace incohérente, alors que le second donne la contribution dite cohérente,

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{incoh.} &= \frac{\sigma_{incoh.}}{4\pi} \frac{|\mathbf{k}'|}{2\pi\hbar|\mathbf{k}|} \sum_{\alpha} \int dt e^{i\omega(t-t')} \left\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t')} \right\rangle \\ \left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{coh.} &= \frac{\sigma_{coh.}}{4\pi} \frac{|\mathbf{k}'|}{2\pi\hbar|\mathbf{k}|} \sum_{\alpha, \alpha'} \int dt e^{i\omega(t-t')} \left\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha}(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \right\rangle. \end{aligned}$$

Les paramètres  $\sigma_{incoh.}$  et  $\sigma_{coh.}$  sont respectivement les sections efficaces incohérente et cohérente totales d'un atome.

Dans le cas d'une cible composée d'atomes de spin non nul, il faut tenir compte des degrés de liberté de spin, à nouveau découplés des degrés de liberté dynamiques et qui peuvent contribuer de façon significative à la diffusion incohérente.

### Corrélations

Les section efficaces partielles de diffusion cohérente et incohérente sont respectivement proportionnelles à la fonction de corrélation densité-densité et à la fonction de "self-corrélation",

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{coh.} = \frac{\sigma_{coh.}}{4\pi} \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \frac{L^2}{2\pi\hbar} C_{nn}(\mathbf{q}, \omega),$$

où l'on définit la transformée de Fourier de la fonction de corrélation densité-densité

$$\begin{aligned} C_{nn}(\mathbf{q}, \omega) &= \int dt e^{i\omega(t-t')} C_{nn}(\mathbf{q}, t-t') \\ &= L^{-3} \int d^3r d^3r' e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \int dt e^{i\omega(t-t')} C_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \\ C_{nn}(\mathbf{q}, t-t') &= L^{-3} \sum_{\alpha, \alpha'} \left\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\alpha(t)} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\alpha'}(t')} \right\rangle. \end{aligned}$$

Pour la partie incohérente, on note

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d^2\Omega} \right)_{incoh.} = \frac{\sigma_{incoh.}}{4\pi} \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \frac{1}{2\pi\hbar} S_{self}(\mathbf{q}, \omega).$$

### Diffusion magnétique

On considère cette fois une cible constituée d'atomes possédant un moment magnétique non nul. Pour simplifier, on se limite au cas où le moment magnétique est uniquement dû au spin des électrons. Chaque électron, de spin  $\mathbf{s}_{e^-}$ , de moment magnétique  $\mathbf{m}_{e^-} = -2\mu_B \mathbf{s}_{e^-}$ , situé en  $\mathbf{r}_{e^-}$ , crée un champ magnétique  $\mathbf{B}_{e^-} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}_{e^-}$ , où le potentiel vecteur du dipôle magnétique vaut

$$\mathbf{A}_{e^-} = \frac{\mu_0}{4\pi} \mathbf{m}_{e^-} \times \vec{\nabla} \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{e^-}|} \right).$$

L'interaction avec le neutron incident, de moment magnétique  $\mathbf{m}_n = -g_n \mu_N \mathbf{s}_n$  où  $\mu_N$  est le magnéton nucléaire et  $g_n = 1.91$  le facteur de Landé du neutron, est donnée par  $U = -\mathbf{m}_n \cdot \mathbf{B}$  où  $\mathbf{B}$  est sommé sur les électrons de la cible, soit

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{3.82}{4\pi} \mu_0 \mu_N \mu_B \mathbf{s}_n \cdot \sum_{e^-} \vec{\nabla} \times \left[ \mathbf{s}_{e^-} \times \vec{\nabla} \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{e^-}|} \right) \right]$$

que l'on simplifie légèrement en introduisant l'aimantation de la cible

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mu_B \sum_{e^-} \mathbf{s}_{e^-} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{e^-}).$$

L'élément de matrice  $\langle \mathbf{k}' \boldsymbol{\sigma}' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \boldsymbol{\sigma} \rangle$  se factorise en une partie spin et une partie spatiale,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' \boldsymbol{\sigma}' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \boldsymbol{\sigma} \rangle &= -\frac{3.82}{4\pi} \mu_0 \mu_N \langle \boldsymbol{\sigma}' | \mathbf{s}_n | \boldsymbol{\sigma} \rangle \\ &\quad \times \int d^3 r d^3 r' e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \vec{\nabla} \times \left[ \mathbf{m}(\mathbf{r}') \times \vec{\nabla} \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \right] \end{aligned}$$

et en utilisant l'identité

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} ,$$

l'élément de matric magnétique peut s'exprimer comme

$$\langle \mathbf{k}' \boldsymbol{\sigma}' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{3.82}{4\pi} \mu_0 \mu_N \langle \boldsymbol{\sigma}' | \mathbf{s}_n | \boldsymbol{\sigma} \rangle \int d^3 r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{4\pi}{q^2} [\mathbf{q} \times (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{q})] .$$

On montre qu'il en découle l'expression de la section efficace différentielle dans laquelle la contribution élastique donne une information sur l'ordre magnétique à grande distance et la partie inélastique fournit des informations sur les excitations de spin,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d^2 \Omega} &= \frac{|\mathbf{k}'|}{|\mathbf{k}|} \left( \frac{m_n^2}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \frac{8\pi \times 1.91 \mu_N}{2\pi \hbar} (\delta_{ij} - \hat{q}_i \hat{q}_j) \\ &\quad \times [L^3 S_{m_i m_j}(\mathbf{q}, \omega) + \langle m_i(\mathbf{q}) \rangle \langle m_j(-\mathbf{q}) \rangle 2\pi \delta(\omega)] . \end{aligned}$$

