

Chapitre XIX

Quantification du rayonnement électromagnétique

A	Quantification du rayonnement en jauge de Coulomb .	427
A-1	Règles de quantification	427
A-2	Rayonnement contenu dans une boîte	429
A-3	Equations de Heisenberg	430
B	Les photons, excitations élémentaires du champ quantique libre	432
B-1	Espace de Fock du champ quantique libre	433
B-2	Interprétation corpusculaire des états d'énergie et d'impulsion totales déterminées	434
B-3	Quelques exemples d'états quantiques du rayonnement .	435
C	Description des interactions	437
C-1	Hamiltonien d'interaction	437
C-2	Interaction avec un atome. Variables externes et variables internes	438
C-3	Approximation des grandes longueurs d'onde	439
C-4	Hamiltonien dipolaire électrique	440
C-5	Eléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction ; règles de sélection	442

Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter une description quantique du champ électromagnétique et de ses interactions avec un ensemble de particules chargées. Une telle description est en effet nécessaire pour interpréter certains phénomènes physiques comme l'*émission spontanée* d'un photon par un atome excité, ce que

ne permettent pas les traitements semi-classiques que nous avons utilisés jusqu'ici¹ (champ décrit classiquement, particules quantiquement). Supposons par exemple qu'un champ monochromatique de fréquence angulaire ω soit représenté par un champ classique $E_0 \cos \omega t$; son interaction avec un atome est alors décrite par l'hamiltonien $\hat{H}_I = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t$, où $\hat{\mathbf{D}}$ est un opérateur (moment dipolaire électrique) tandis que $\mathbf{E}_0$ reste une grandeur classique². Un tel traitement est suffisant pour comprendre comment le champ peut exciter l'atome de manière résonnante depuis son niveau fondamental a d'énergie E_a vers un niveau excité b d'énergie E_b , lorsque ω est proche de la pulsation de Bohr atomique $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$. Mais supposons maintenant que l'atome se trouve initialement dans l'état excité b , et en l'absence de tout rayonnement incident. Le champ classique $\mathbf{E}_0$ est alors identiquement nul, ainsi donc que l'hamiltonien d'interaction $\hat{H}_I$, de sorte que l'hamiltonien du système total se réduit à l'hamiltonien atomique $\hat{H}_A$. Comme cet opérateur est indépendant du temps, ses états propres sont stationnaires, en particulier l'état excité b . La théorie semi-classique prédit ainsi qu'un atome, initialement excité dans un état b en l'absence de rayonnement incident, demeure indéfiniment dans cet état. Or ce n'est pas ce qui est observé expérimentalement : au bout d'un certain temps, l'atome tombe spontanément dans un niveau inférieur a en émettant un photon dont la fréquence est voisine de $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$. Ce processus est appelé *émission spontanée*; le temps moyen nécessaire pour qu'il se produise est appelé *durée de vie radiative* de l'état excité b . Ceci fournit un premier exemple de situation où un traitement quantique du rayonnement est indispensable. Mais cet exemple est loin d'être isolé : de nombreuses expériences, de plus en plus élaborées, ont mis en jeu des situations qui nécessitent une description quantique du champ électromagnétique.

L'objet de ce chapitre est donc de présenter les bases de cette description, tout en suivant une approche aussi simple que possible – une présentation plus générale de la quantification du champ de rayonnement électromagnétique est possible en partant de la formulation lagrangienne de l'électrodynamique (Complément A_{XVIII}). Dans le chapitre précédent, nous avons souligné l'analogie qui existe entre les modes propres de vibration du champ de rayonnement et un ensemble d'oscillateurs harmoniques à une dimension. Dans le § A de ce chapitre, nous allons donc utiliser cette analogie pour procéder à une quantification simple de cet ensemble d'oscillateurs : à chaque mode propre i du champ classique, décrit par des variables normales α_i et α_i^* , nous associerons des opérateurs d'annihilation $\hat{a}_i$ et de création $\hat{a}_i^\dagger$ qui obéissent aux relations de commutation bien connues $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = 1$. Nous postulons également une forme plausible pour l'hamiltonien quantique du système "champ + particules", à partir de l'énergie classique de ce système établie dans le chapitre précédent. Nous verrons alors que les équations d'évolution³ des diverses grandeurs dans le point de vue de Heisenberg (Complément G_{III}) ne sont autres que la transposition des équations de Maxwell-Lorentz à des opérateurs décrivant les champs et les particules, convenablement symétrisés. Ceci fournit une justification a posteriori de la procédure simple de quantification utilisée.

Le § B décrit quelques propriétés importantes du champ libre (en l'absence de

1. C'est par exemple ce qui a été fait au Complément A_{XIII} dans l'étude de l'interaction d'un atome avec une onde électromagnétique.

2. Pour plus de clarté, nous utilisons dans tout ce chapitre et ses compléments un symbole "chapeau" pour distinguer l'opérateur $\hat{G}$ de la grandeur classique correspondante G .

3. De manière plus concise, nous les appellerons équations de Heisenberg.

sources). La structure de l'espace des états de ce champ est celle d'un produit tensoriel d'espaces de Fock, analogues à ceux étudiés dans le Chapitre XV ; les excitations élémentaires du champ ne sont autres que les photons. Quelques états importants du champ seront également décrits : le vide de photons où aucun photon n'est présent, mais où pourtant il existe dans tout l'espace un champ fluctuant autour d'une valeur moyenne nulle ; les états quasi classiques, qui reproduisent les propriétés d'un champ classique donné.

Le § C est consacré à l'étude de l'hamiltonien d'interaction entre champ électromagnétique et particules, en particulier dans le cas où les particules sont des atomes neutres (comme dans l'atome d'hydrogène, où les charges positives et négatives des constituants de l'atome s'équilibrent entre elles). Il est alors possible de distinguer deux types de variables atomiques : les variables du centre de masse (variables externes) et les variables de la "particule relative" dans le système du centre de masse (variables internes). Nous étudierons également l'approximation dipolaire électrique, valable si la longueur d'onde du rayonnement est grande devant les dimensions atomiques, ainsi que les règles de sélection associées à l'hamiltonien d'interaction.

A. Quantification du rayonnement en jauge de Coulomb

A-1. Règles de quantification

Dans le chapitre précédent, nous avons établi l'expression suivante de l'énergie du champ transverse classique :

$$H_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \sum_{\epsilon} \frac{\omega^2}{4N^2(k)} [\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)] \quad (\text{A-1})$$

où $\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)$ sont les variables normales décrivant l'état du champ transverse, et où $N(k)$ est une constante de normalisation réelle apparaissant dans les équations qui définissent les variables normales en fonction du potentiel vecteur transverse et de sa dérivée temporelle :

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{k}, t) &= N(k) \left[\tilde{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \right] \\ \alpha^*(\mathbf{k}, t) &= N(k) \left[\tilde{A}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{A}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

L'analogie entre le champ transverse libre et un ensemble d'oscillateurs harmoniques classiques de fréquence ω associés aux modes $\{\mathbf{k}, \epsilon\}$ apparaît clairement sur l'expression (A-1).

Pour quantifier le champ, cette analogie suggère de remplacer les variables normales $\alpha(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha^*(\mathbf{k}, t)$ par des opérateurs d'annihilation et de création. Nous utiliserons dans ce § A le point de vue de Schrödinger où ces opérateurs sont indépendants du temps, et où la dépendance temporelle est contenue uniquement dans l'évolution du vecteur d'état. La quantification consistera donc à remplacer les $\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t = 0)$ par des opérateurs d'annihilation $a_{\epsilon}(\mathbf{k})$ indépendant du temps, ainsi bien sûr que les $\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t = 0)$ par les opérateurs de création adjoints $a_{\epsilon}^{\dagger}(\mathbf{k})$. Lorsque cette opération est effectuée sur (A-1), pour que l'hamiltonien quantique obtenu soit

une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques standard, il faut que le facteur $\omega^2/4\mathcal{N}^2(k)$ multipliant le crochet du second membre de (A-1) soit égal à $\hbar\omega/2\epsilon_0$. Nous choisirons donc pour $\mathcal{N}(k)$ la valeur :

$$\mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 ck}{2\hbar}} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega}{2\hbar}} \quad (\text{A-3})$$

Nous retrouvons ainsi la relation (69) du Complément A_{XVIII}, obtenue à partir des relations de commutation. Remplaçons alors dans (A-1) les variables normales classiques $\alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha_\epsilon^*(\mathbf{k}, t)$ par les opérateurs $\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})$ et $\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})$ satisfaisant aux relations de commutation :

$$[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{A-4a})$$

$$[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}(\mathbf{k}')] = [\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}^\dagger(\mathbf{k}')] = 0 \quad (\text{A-4b})$$

On obtient l'opérateur hamiltonien (cet opérateur sera souvent utilisé, de sorte que nous simplifierons la notation $\hat{H}_{\text{trans}}$ en $\hat{H}_R$) :

$$\hat{H}_R \equiv \hat{H}_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})] \quad (\text{A-5})$$

qui a la forme attendue pour l'hamiltonien quantique du champ transverse.

Etendant une telle procédure, nous remplaçons ensuite les variables normales classiques par des opérateurs d'annihilation et de création dans toutes les expressions classiques établies dans le chapitre précédent pour les diverses grandeurs physiques. L'impulsion transverse – cf. équation (B-27) du Chapitre XVIII – devient ainsi :

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} [\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})] \quad (\text{A-6})$$

Quant aux champs transverses, écrits en (B-29), (B-30) et (B-28) du Chapitre XVIII, ils deviennent des combinaisons linéaires des opérateurs d'annihilation et de création :

$$\hat{\mathbf{E}}_\perp(\mathbf{r}) = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0} \right]^{1/2} [\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{A-7})$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{c} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0} \right]^{1/2} [\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{A-8})$$

$$\hat{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega} \right]^{1/2} [\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{A-9})$$

Enfin, l'énergie totale du système “particules + champs” donnée par la relation (A-47) du Chapitre XVIII devient :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2m_a} \sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a - q_a \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} \\ & + \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})] \end{aligned} \quad (\text{A-10})$$

qui a une forme plausible pour être considérée comme l'hamiltonien quantique du système "particules + champs". Les opérateurs positions $\hat{\mathbf{r}}_a$ et impulsions $\hat{\mathbf{p}}_a$ définis à partir de l'équation (A-46) du Chapitre XVIII satisfont aux relations de commutation habituelles :

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, (\hat{\mathbf{p}}_b)_j] = i\hbar \delta_{ab} \delta_{ij} \quad (\text{A-11a})$$

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, (\hat{\mathbf{r}}_b)_j] = [(\hat{\mathbf{p}}_a)_i, (\hat{\mathbf{p}}_b)_j] = 0 \quad (\text{A-11b})$$

Les règles de quantification que nous venons d'introduire de manière heuristique ont l'avantage de la simplicité. Nous allons de plus montrer que les équations de Heisenberg des divers opérateurs décrivant les particules et les champs, déduites de l'hamiltonien (A-10) ainsi que des relations de commutation (A-4), (A-11a) et (A-11b), sont bien les équations de Maxwell-Lorentz entre opérateurs. Un tel résultat conforte a posteriori la procédure de quantification exposée dans ce chapitre.

A-2. Rayonnement contenu dans une boîte

Dans un espace infini, $\mathbf{k}$ est une variable continue, et il existe une infinité continue de modes. Mais, comme nous l'avons mentionné au § B-3 du Chapitre XVIII, il est souvent plus commode de considérer que les champs sont contenus dans un cube de côté L avec des conditions aux limites périodiques ; la variable $\mathbf{k}$ devient alors discrète :

$$k_{x,y,z} = 2\pi n_{x,y,z}/L \quad (\text{A-12})$$

où $n_{x,y,z}$ sont des entiers positifs, négatifs ou nuls. Si L est suffisamment grand, toutes les prédictions physiques doivent être indépendantes de L . Une telle approche conduit à remplacer les intégrales de Fourier par des séries de Fourier et les intégrales sur $\mathbf{k}$ par des sommes discrètes. Pour un champ classique, les variables continues $\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ deviennent alors des variables discrètes $\alpha_{\mathbf{k},\epsilon}(t)$; si le champ est nul hors de la boîte, la relation (B-35) du chapitre XVIII indique le coefficient de multiplication qui s'introduit alors entre les deux types de variables.

Pour quantifier le système, on procède alors comme précédemment. En point de vue de Schrödinger, chaque coefficient classique $\alpha_{\mathbf{k},\epsilon}(t=0)$ d'une série de Fourier devient un opérateur d'annihilation $\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}$; chaque coefficient $\alpha_{\mathbf{k},\epsilon}^*(t=0)$ devient un opérateur de création $\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}^\dagger$. Ce dernier crée un quantum dans un mode du champ confiné à l'intérieur de la boîte (au lieu de s'étendre dans tout l'espace). Les relations de commutation (A-4) deviennent alors :

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\epsilon'}^\dagger] = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (\text{A-13a})$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\epsilon'}] = [\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}',\epsilon'}^\dagger] = 0 \quad (\text{A-13b})$$

La relation (B-36) du Chapitre XVIII indique que, une fois que les variables discrètes ont été insérées dans les expressions des champs, il faut appliquer la règle suivante de correspondance entre sommes continues et discrètes :

$$\int d^3k \Rightarrow \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} \sum_{\mathbf{k}} \quad (\text{A-14})$$

Les expressions (A-7) à (A-9) sont alors modifiées. Par exemple, la relation (A-7) devient :

$$\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{k}, \epsilon} \left[\frac{\hbar \omega}{2 \epsilon_0 L^3} \right]^{1/2} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}, \epsilon} \epsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \epsilon}^{\dagger} \epsilon e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\text{A-15})$$

En plus du remplacement de l'intégrale par une somme discrète, accompagné d'une multiplication par un facteur $(2\pi)^{3/2}$, il faut donc ne pas oublier de diviser le développement du champ par la racine carrée du volume L^3 . Les deux relations (A-8) et (A-9) subissent les mêmes modifications.

A-3. Equations de Heisenberg

A-3-a. Equations de Heisenberg des particules matérielles

Commençons par l'équation d'évolution de $\hat{\mathbf{r}}_a(t)$:

$$\dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}_a(t), \hat{H}] \quad (\text{A-16})$$

Le seul terme de l'hamiltonien (A-10) qui ne commute pas avec $\hat{\mathbf{r}}_a$ est le premier terme. En utilisant la relation de commutation qui découle de (A-11a) et (A-11b) :

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, f((\hat{\mathbf{p}}_a)_j)] = \delta_{ij} \frac{\partial f}{\partial (\hat{\mathbf{p}}_a)_i} \quad (\text{A-17})$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}_a(t), \frac{1}{2m_a} \left(\hat{\mathbf{p}}_a(t) - q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a(t) - q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{A-18})$$

Cette égalité n'est autre que la transposition opératorielle :

$$\hat{\mathbf{p}}_a(t) = m_a \dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) + q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \quad (\text{A-19})$$

de l'équation classique reliant impulsion $\mathbf{p}_a$ et quantité de mouvement $m_a \dot{\mathbf{r}}_a$.

Considérons maintenant l'équation de Heisenberg donnant l'évolution de la vitesse $\dot{\hat{\mathbf{v}}}_a$ de la particule a . Elle fournit l'équation de la dynamique de cette particule :

$$m_a \dot{\hat{\mathbf{v}}}_a(t) = m_a \ddot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) = \frac{m_a}{i\hbar} [\hat{\mathbf{v}}_a(t), \hat{H}] \quad (\text{A-20})$$

Nous effectuons ci-dessous le calcul du commutateur $[\hat{\mathbf{v}}_a(t), \hat{H}]$; il conduit à l'équation quantique du mouvement de la particule a :

$$m_a \ddot{\hat{\mathbf{r}}}_a = q_a \hat{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{r}}_a) + \frac{q_a}{2} [\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a] \quad (\text{A-21})$$

qui n'est autre que l'équation de Lorentz quantique décrivant le mouvement des particules sous l'effet de l'interaction avec le champ magnétique $\hat{\mathbf{B}}$ et avec le champ électrique total $\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{E}}_{\parallel} + \hat{\mathbf{E}}_{\perp}$. La force magnétique $q_a [\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a] / 2$

prend une forme particulière qui résulte, comme le montre le calcul ci-dessous, du calcul des équations de Heisenberg ; cette forme provient du fait que l'opérateur $\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a)$ n'est pas hermitique. Pour le rendre hermitique, il faut lui ajouter son adjoint $\left(\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a)\right)^\dagger$, qui n'est autre que $-\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a$, et diviser le tout par 2.

Démonstration de l'équation (A-21)

Pour calculer le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le premier terme de $\hat{H}$, il est commode de calculer au préalable les commutateurs suivants :

$$\begin{aligned} m_a^2 [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] &= -q_a \left[(\hat{\mathbf{p}}_a)_j, (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_l \right] - q_a \left[(\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j, (\hat{\mathbf{p}}_a)_l \right] \\ &= i\hbar q_a \left[\partial_j (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_l - \partial_l (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \right] \\ &= i\hbar q_a \sum_k \varepsilon_{jlk} (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k, \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

où ε_{jkl} est le tenseur complètement antisymétrique permettant d'écrire les composantes du produit vectoriel de deux vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$ sous la forme $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_k = \sum_{jl} \varepsilon_{kjl} a_j b_l$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{m_a}{i\hbar} \left[(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, \sum_l m_a (\hat{\mathbf{v}}_a)_l^2 / 2 \right] &= \frac{m_a^2}{2i\hbar} \sum_l \{ (\hat{\mathbf{v}}_a)_l [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] + [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] (\hat{\mathbf{v}}_a)_l \} \end{aligned} \quad (\text{A-23})$$

$$= \frac{q_a}{2} \sum_k \sum_l \varepsilon_{jlk} \{ (\hat{\mathbf{v}}_a)_l (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k + (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k (\hat{\mathbf{v}}_a)_l \} \quad (\text{A-24})$$

La dernière ligne de (A-24) peut être écrite sous la forme :

$$\frac{q_a}{2} \left[\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a \right]_j \quad (\text{A-25})$$

et apparaît comme la composante sur l'axe j de la force magnétique symétrisée. Le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le second terme de $\hat{H}$ s'écrit :

$$\frac{m_a}{i\hbar} [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, V_{\text{Coul}}] = \frac{1}{i\hbar} [(\hat{\mathbf{p}}_a)_j, V_{\text{Coul}}] = -\frac{\partial}{\partial(\hat{\mathbf{r}}_a)_j} V_{\text{Coul}} = q_a (\hat{\mathbf{E}}_\parallel(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \quad (\text{A-26})$$

Il décrit l'interaction de la particule a avec le champ électrique longitudinal.

Reste enfin à calculer le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le dernier terme de $\hat{H}$. En utilisant les relations de commutation (A-4) et les expressions (A-9) et (A-7) de $\hat{\mathbf{A}}_\perp$ et $\hat{\mathbf{E}}_\perp$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{m_a}{i\hbar} \left[(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, \int d^3k \sum_\varepsilon \hbar\omega \left(\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + 1/2 \right) \right] &= iq_a \int d^3k \sum_\varepsilon \omega \left[(\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j, \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) \right] \\ &= q_a (\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \end{aligned} \quad (\text{A-27})$$

Ce terme décrit l'interaction de la particule a avec le champ électrique transverse. Finalement, le regroupement de (A-25), (A-26) et (A-27) conduit à (A-21).

A-3-b. Equations de Heisenberg des champs

Comme tous les champs sont des combinaisons linéaires des opérateurs $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$ et $\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)$, il suffit de considérer l'équation de Heisenberg pour $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$:

$$\dot{\hat{a}}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \hat{H}] \quad (\text{A-28})$$

Le commutateur avec le premier terme de $\hat{H}$ donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \sum_a \frac{m_a \hat{\mathbf{v}}_a^2}{2} \right] &= \sum_a \frac{m_a}{2i\hbar} \left\{ \hat{\mathbf{v}}_a \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_a}{\partial \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)} + \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_a}{\partial \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)} \cdot \hat{\mathbf{v}}_a \right\} \\ &= \sum_a \frac{i q_a}{2\hbar} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot [\hat{\mathbf{v}}_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} \hat{\mathbf{v}}_a] \end{aligned} \quad (\text{A-29})$$

Si l'on introduit l'opérateur courant (symétrisé pour le rendre hermitique) :

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_a q_a [\hat{\mathbf{v}}_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) + \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) \hat{\mathbf{v}}_a] \quad (\text{A-30})$$

l'équation (A-29) peut être ré-écrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \sum_a \frac{i q_a}{2\hbar} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot [\hat{\mathbf{v}}_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} \hat{\mathbf{v}}_a] &= \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega} (2\pi)^3} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \tilde{\hat{\mathbf{j}}}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{A-31})$$

Le commutateur avec le second terme de $\hat{H}$ est nul, alors que le commutateur avec le troisième donne, compte tenu de (A-4) :

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \int d^3 k \sum_\varepsilon \hbar \omega (\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + 1/2) \right] = -i\omega \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-32})$$

Finalement, le regroupement de (A-31) et (A-32) donne :

$$\dot{\hat{a}}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + i\omega \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \tilde{\hat{\mathbf{j}}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-33})$$

qui est, pour l'opérateur $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$, une équation d'évolution de même forme que l'équation d'évolution des variables normales classiques $\alpha(\mathbf{k}, t)$, donnée par l'équation (B-19) du Chapitre XVIII. Comme cette dernière est équivalente aux équations de Maxwell pour les champs transverses, la conclusion est que les équations de Heisenberg des champs transverses quantiques ne sont autres que des équations de Maxwell habituelles appliquées aux opérateurs champ.

B. Les photons, excitations élémentaires du champ quantique libre

Nous étudions maintenant un certain nombre de propriétés du champ électromagnétique ainsi quantifié, en commençant par le cas plus simple : celui du champ en l'absence de particules chargées.

B-1. Espace de Fock du champ quantique libre

L'espace des états du système total champ + particules est le produit tensoriel de l'espace des états des particules $\mathcal{E}_P$ par celui du champ de rayonnement $\mathcal{E}_R$. Ce dernier est lui-même le produit tensoriel des espaces des états des oscillateurs harmoniques associés aux divers modes $\{\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}\}$:

$$\mathcal{E}_R = \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_1} \otimes \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i} \otimes \dots \quad (\text{B-1})$$

où $\mathcal{E}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i}$ est l'espace des états de l'oscillateur associé au mode $\{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i\}$, de fréquence ω_i .

Nous supposons que le rayonnement est contenu dans un cube de côté L , comme nous l'avons déjà fait au § A-2. Les opérateurs $\hat{a}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})$ dépendant des variables continues $\mathbf{k}$ se transforment alors en des opérateurs $\hat{a}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i}$ dépendant uniquement de variables discrètes. On peut même utiliser des notations $\hat{a}_i$ plus concises, où l'indice i désigne⁴ l'ensemble des indices $\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i$; les opérateurs $\hat{a}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})$ deviennent alors les $\hat{a}_i$. Comme nous supposons dans cette partie les interactions nulles, il sera commode d'utiliser le point de vue de Heisenberg. La dépendance temporelle des $\hat{a}_i$ et $\hat{a}_i^\dagger$ est particulièrement simple, puisque :

$$\hat{a}_i(t) = \exp(i\hat{H}_R t/\hbar) \hat{a}_i \exp(-i\hat{H}_R t/\hbar) = \hat{a}_i e^{-i\omega_i t} \quad (\text{B-2})$$

ainsi que la relation adjointe.

Une fois les variables discrètes insérées dans les expressions continues des champs, il faut utiliser la règle (A-14) pour transformer les intégrales continues en sommes discrètes. Les développements de ces champs en variables normales sont alors :

$$\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = i \sum_i \left(\frac{\hbar \omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-3})$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = i \sum_i \left(\frac{\hbar k_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-4})$$

$$\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_i L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} + \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-5})$$

$$\hat{H}_R = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right] = \sum_i \hbar \omega_i \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{B-6})$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}} = \sum_i \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{2} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right] = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (\text{B-7})$$

On remarque que le dernier terme de (B-7) ne contient pas de $1/2$, du fait que $\sum_i \mathbf{k}_i = \mathbf{0}$.

4. Pour chaque $\mathbf{k}_i$, il existe deux vecteurs polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_{i1}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{i2}$ perpendiculaires à $\mathbf{k}_i$ et perpendiculaires entre eux. La notation compacte $\sum_i$ doit donc être comprise comme une sommation sur $\mathbf{k}_i$ et, pour chaque valeur de $\mathbf{k}_i$, sur $\boldsymbol{\varepsilon}_{i1}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{i2}$.

B-2. Interprétation corpusculaire des états d'énergie et d'impulsion totales déterminées

Considérons tout d'abord le mode i . Les valeurs propres de l'opérateur $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ qui apparaît dans les expressions (B-6) et (B-7) de $\hat{H}_R$ et $\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}}$ sont tous les entiers n_i positifs ou nuls :

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B-8})$$

Rappelons l'action bien connue des opérateurs $\hat{a}_i^\dagger$ et $\hat{a}_i$ sur les états $|n_i\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \\ \hat{a}_i |n_i\rangle &= \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \\ \hat{a}_i |0_i\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B-9})$$

Comme $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ commute avec $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$, les états propres de $\hat{H}_R$ et $\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}}$ sont les produits tensoriels des états propres $|n_1 \dots n_i \dots\rangle = |n_1\rangle \otimes \dots \otimes |n_i\rangle \dots$ des opérateurs $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \dots$:

$$\hat{H}_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \quad (\text{B-10a})$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}} |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \quad (\text{B-10b})$$

L'état fondamental du champ correspond à tous les n_i nuls et sera noté $|0\rangle$:

$$|0\rangle = |0_1 \dots 0_i \dots\rangle \quad (\text{B-11})$$

les états $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ étant obtenus par action d'un certain nombre d'opérateurs de création sur cet état $|0\rangle$:

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \dots \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \dots |0\rangle \quad (\text{B-12})$$

Par rapport à l'état fondamental du champ, l'état $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ a une énergie $\sum_i n_i \hbar \omega_i$ et une impulsion $\sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i$. Il peut être interprété comme décrivant un ensemble de n_1 particules d'énergie $\hbar \omega_1$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_1$, ..., de n_i particules d'énergie $\hbar \omega_i$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_i$, ... Ces particules caractérisent les excitations élémentaires du champ quantique et sont appelées *photons*. Le nombre quantique n_i représente donc le nombre de photons occupant le mode i , de sorte que l'état fondamental $|0\rangle$, qui correspond à tous les n_i nuls, peut être appelé le *vide* de photons.

S'il existe pour des photons des états propres de l'impulsion et de l'énergie, il n'existe pas d'état quantique du champ électromagnétique dont la position serait parfaitement déterminée; aucun opérateur de position n'est associé à ce champ. La situation est donc différente de celle que l'on rencontre avec des particules massives, qui ont à la fois un opérateur de position et un autre d'impulsion; les fonctions d'onde dans les deux représentations sont reliées par une simple transformation de Fourier. Cette absence d'opérateur position est reliée à l'impossibilité, en superposant linéairement des ondes électromagnétiques qui sont transversales, de construire une onde vectorielle qui serait parfaitement localisée en un point de l'espace. Le caractère relativiste et transversal du champ électromagnétique se traduit par des relations de commutation de ses composantes qui font intervenir une fonction delta transverse (Complément A_{XVIII}, § 2-e) au lieu d'une fonction delta ordinaire.

B-3. Quelques exemples d'états quantiques du rayonnement

Etudions maintenant quelques exemples d'états dans lesquels peut se trouver le rayonnement quantique.

B-3-a. Vide de photons

La présence du terme $1/2$ dans la parenthèse du second membre de (B-10a) entraîne que l'énergie de l'état vide n'est pas nulle, mais égale à $\sum_i \hbar\omega_i/2$; or cette somme est une quantité infinie. Nous trouvons ici un premier exemple des difficultés liées aux divergences qui apparaissent en électrodynamique quantique. Elles peuvent être résolues par les techniques de *renormalisation*, dont l'exposé sort du cadre de cet ouvrage. Nous contournerons cette difficulté en ne prenant en compte que les différences d'énergie par rapport au vide.

Si l'on considère un seul mode i du champ, l'énergie $\hbar\omega_i/2$ de l'état vide de ce mode est finie et rappelle l'énergie de point zéro d'un oscillateur harmonique de fréquence ω_i . Rappelons que cette énergie de point zéro est due à l'impossibilité d'annuler simultanément la position x et l'impulsion p de l'oscillateur en raison des relations de Heisenberg. L'état d'énergie la plus basse de l'oscillateur résulte donc d'un compromis entre énergie cinétique, proportionnelle à p^2 , et énergie potentielle, proportionnelle à x^2 (problème discuté dans le § D-2 du Chapitre V). Les mêmes arguments peuvent être développés pour la contribution du mode i au champ électrique $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ et au champ magnétique $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t)$ en un point donné $\mathbf{r}$; d'après (B-3) et (B-4), ce sont deux superpositions linéaires différentes des opérateurs $\hat{a}_i$ et $\hat{a}_i^{\dagger}$, qui donc ne commutent pas. Il est donc impossible d'annuler simultanément l'énergie électrique, proportionnelle à $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2$, et l'énergie magnétique, proportionnelle à $\hat{\mathbf{B}}^2$.

On peut d'ailleurs calculer la valeur moyenne et la variance de la contribution du mode i au champ électrique $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ en un point $\mathbf{r}$. Comme $\hat{a}_i$ et $\hat{a}_i^{\dagger}$ changent n_i de ± 1 , un calcul simple donne :

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle_{\text{mode } i} = 0 \quad (\text{B-13a})$$

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle_{\text{mode } i} = \frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} \quad (\text{B-13b})$$

Des calculs analogues s'appliquent pour le champ magnétique. Ils montrent que, dans l'état vide de photons, la valeur moyenne des champs électrique et magnétique est nulle mais que la variance ne l'est pas. Comme le résultat (B-13b) est proportionnel à $\hbar$, le fait que la variance des champs dans le vide n'est pas nulle est un effet quantique.

Remarques

(i) La somme sur tous les modes des expressions (B-13) donne, après remplacement de la somme discrète par une intégrale :

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle = 0 \quad (\text{B-14a})$$

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle = \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} = \frac{\hbar c}{2\varepsilon_0 \pi^2} \int_0^{k_M} k^3 dk \quad (\text{B-14b})$$

La variance du champ électrique diverge donc comme la quatrième puissance de la borne supérieure de l'intégrale sur k qui apparaît dans la somme sur les modes de fréquence $\omega = ck$. C'est la même divergence que celle signalée plus haut.

(ii) On peut aussi calculer les fonctions de corrélation des champs dans le vide ⁵, qui caractérisent la dynamique des fluctuations de ces champs. On trouve que les champs électrique et magnétique fluctuent très rapidement autour de leur valeur moyenne nulle. Ces fluctuations sont appelées *fluctuations du vide*. Certaines corrections radiatives, comme le déplacement de Lamb ou “Lamb shift” dans les atomes, peuvent être interprétées physiquement comme résultant de la vibration de l’électron atomique sous l’effet de l’interaction avec ce champ électrique fluctuant. Cette vibration entraîne en effet que l’électron explore le potentiel coulombien du noyau sur l’étendue de son mouvement de vibration. La correction à son énergie de liaison que ceci introduit n’est pas la même suivant le niveau d’énergie dans lequel il se trouve, et on peut comprendre ainsi pourquoi la dégénérescence entre les états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l’atome d’hydrogène, prévue par l’équation de Dirac, peut être levée par l’interaction avec les fluctuations du vide ⁶.

B-3-b. Etats quasi classiques du champ

L’état et les observables d’un champ classique sont caractérisés par les variables normales $\{\alpha_i\}$ introduites dans le § B. Les états cohérents d’un oscillateur harmonique à une dimension, étudiés dans le Complément G_V, peuvent être utilisés pour construire les états du champ quantique qui reproduisent au mieux les propriétés du champ classique $\{\alpha_i\}$

L’état cohérent $|\alpha\rangle$, supposé normé, d’un oscillateur harmonique à une dimension est l’état propre de l’opérateur d’annihilation $\hat{a}$, de valeur propre α :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (\text{B-15})$$

La valeur propre α peut être complexe car l’opérateur $\hat{a}$ n’est pas hermitique. L’équation (B-15) entraîne que :

$$\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha \quad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^* \quad (\text{B-16})$$

Plus généralement, la valeur moyenne de toute fonction de $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$, une fois rangée dans l’ordre *normal*, c’est-à-dire avec tous les opérateurs d’annihilation rangés à droite des opérateurs de création (Complément B_{XVI}, § 1-a- α), est égale à l’expression obtenue en remplaçant l’opérateur $\hat{a}$ par α et l’opérateur $\hat{a}^\dagger$ par α^* . Par exemple :

$$\langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha^*\alpha \quad (\text{B-17})$$

Considérons alors l’état du champ quantique :

$$|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots |\alpha_i\rangle \dots = |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i, \dots\rangle \quad (\text{B-18})$$

pour lequel chaque mode i est dans l’état cohérent $|\alpha_i\rangle$ correspondant à la variable normale classique α_i . En utilisant les équations (B-16) et (B-17), on peut obtenir les valeurs moyennes des divers opérateurs champs (B-3), (B-4) et (B-5) dans l’état (B-18) ; on constate alors qu’elles coïncident avec les valeurs de ces diverses grandeurs physiques pour un champ classique décrit par les variables normales $\{\alpha_i\}$. Il en est

5. Voir par exemple le paragraphe III.C.3.c de la référence [15] ainsi que son Complément C_{III}.

6. Voir par exemple [16].

de même des observables énergie et impulsion du champ transverse (B-6) et (B-7). C'est pourquoi l'état quantique (B-18), qui reproduit en valeur moyenne toutes ces propriétés d'un champ classique, est appelé *état quasi classique*⁷. Nous verrons également plus loin que les fonctions de corrélation des champs quantique et classique intervenant dans les divers signaux de photodétection coïncident lorsque l'état du champ est un état quasi classique.

B-3-c. Etats à un photon

Considérons le vecteur d'état :

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |1_i\rangle \otimes \prod_{j \neq i} |0_j\rangle \quad (\text{B-19})$$

superposition linéaire de kets où un mode i contient un photon alors que tous les autres modes $j \neq i$ sont vides. Un tel ket est un ket propre de l'opérateur nombre total de photons $\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ avec la valeur propre 1. C'est donc bien un état à un photon. En revanche, sauf cas particulier, ce n'est pas un état stationnaire car il n'est pas état propre de l'énergie $\hat{H}_R$ du champ. Il décrit un photon unique se propageant dans l'espace à la vitesse c . Nous verrons effectivement plus loin (Complément D_{XX}) qu'un photodétecteur placé dans une petite région de l'espace enregistre, lorsque le champ est dans l'état (B-19), un signal traduisant le passage dans cette région d'un paquet d'ondes.

C. Description des interactions

C-1. Hamiltonien d'interaction

L'hamiltonien $\hat{H}$ du système "particules + champ" a été donné plus haut. Dans l'expression (A-10) de cet hamiltonien, séparons les termes qui ne dépendent que des variables des particules, ceux qui ne dépendent que des variables du rayonnement, et enfin ceux qui dépendent à la fois des deux types de variables. Nous pouvons alors écrire $\hat{H} = \hat{H}_P + \hat{H}_R + \hat{H}_I$, où l'hamiltonien des particules est :

$$\hat{H}_P = \sum_a \frac{\hat{p}_a^2}{2m_a} + \hat{V}_{\text{Coul}} \quad (\text{C-1})$$

alors que celui du rayonnement est :

$$\hat{H}_R = \sum_i \hbar \omega_i \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{C-2})$$

Enfin, l'hamiltonien d'interaction est la somme :

$$\hat{H}_I = \hat{H}_{I1} + \hat{H}_{I2}, \quad (\text{C-3})$$

avec :

$$\hat{H}_{I1} = - \sum_a \frac{q_a}{2m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) + \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right] \quad (\text{C-4})$$

7. Pour une discussion plus détaillée des propriétés des états quasi classiques du rayonnement, voir le § III.C.4 de la référence [15].

$$\hat{H}_{I2} = \sum_a \frac{q_a^2}{2m_a} [\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a)]^2 \quad (\text{C-5})$$

(nous avons séparé les termes linéaires et quadratiques vis-à-vis des champs).

De plus, il faut également ajouter à l'hamiltonien d'interaction le terme :

$$\hat{H}_{I1}^s = - \sum_a \hat{\mathbf{M}}_a^s \cdot \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \quad (\text{C-6})$$

décrivant l'interaction, avec le champ magnétique du rayonnement, du moment magnétique de spin des diverses particules :

$$\hat{\mathbf{M}}_a^s = g_a \frac{q_a}{2m_a} \hat{\mathbf{S}}_a \quad (\text{C-7})$$

où g_a est le “facteur de Landé” de la particule a dont le spin est noté $\hat{\mathbf{S}}_a$.

Remarque

Même avec ce terme supplémentaire, toutes les interactions possibles ne sont pas contenues dans l'hamiltonien : il faudrait lui ajouter le couplage spin-orbite des électrons, l'interaction hyperfine entre l'électron et le noyau, etc. – cf. Remarque (iii) du § C-5. Cependant, l'hamiltonien que nous avons écrit est suffisant dans un grand nombre de cas.

C-2. Interaction avec un atome. Variables externes et variables internes

Considérons maintenant le cas où le système de particules est constitué d'un atome que nous supposons ici neutre, formé d'un électron e dont les opérateurs position et impulsion sont respectivement $\hat{\mathbf{r}}_e$ et $\hat{\mathbf{p}}_e$ et d'un noyau N dont les opérateurs position et impulsion sont respectivement $\hat{\mathbf{r}}_N$ et $\hat{\mathbf{p}}_N$; les charges des deux particules sont opposées ($q_e = -q_N = q$) et leurs masses sont notées m_e et m_N . C'est le cas par exemple de l'atome d'hydrogène. Il est bien connu (voir par exemple le § B du Chapitre VII) qu'on peut séparer les variables $\hat{\mathbf{R}}$ et $\hat{\mathbf{P}}$ du centre de masse du système et les variables $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ de la particule relative. Ces deux types de variables commutent entre elles et sont données par les équations :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{R}} = \frac{m_e \hat{\mathbf{r}}_e + m_N \hat{\mathbf{r}}_N}{M} \\ \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_N \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_e + \hat{\mathbf{p}}_N \\ \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e}{m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_N}{m_N} \end{cases} \quad (\text{C-8})$$

où nous avons noté la masse totale du système M et sa masse réduite m :

$$M = m_e + m_N \quad ; \quad m = \frac{m_e m_N}{M} \quad (\text{C-9})$$

Exprimé en fonction de ces nouvelles variables, l'hamiltonien de particules s'écrit :

$$\hat{H}_P = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{C-10})$$

Les variables du centre de masse, appelées encore *variables externes*, décrivent le mouvement global de l'atome, alors que les variables de la particule relative, appelées encore *variables internes*, décrivent le mouvement dans le référentiel du centre de masse.

C-3. Approximation des grandes longueurs d'onde

Dans les hamiltoniens d'interaction (C-4), (C-5) et (C-6) apparaissent les champs évalués aux positions $\mathbf{r}_e$ et $\mathbf{r}_N$ de l'électron et du noyau. On peut repérer la position de l'électron et du noyau par rapport à celle du centre de masse et écrire par exemple :

$$\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) = \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{R}}) \quad (\text{C-11})$$

Dans un atome, la distance entre la position de l'électron ou du noyau et celle du centre de masse de l'atome est de l'ordre de la dimension de l'atome, c'est-à-dire une fraction de nanomètre. Or, les longueurs d'onde des rayonnements susceptibles d'interagir de manière résonnante avec l'atome sont de l'ordre d'une fraction de micron, beaucoup plus grandes que la dimension atomique. On peut donc négliger la variation des champs sur des distances de l'ordre de $|\mathbf{r}_e - \mathbf{R}|$ (ou $|\mathbf{r}_N - \mathbf{R}|$) et écrire :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) &\simeq \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \\ \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_N) &\simeq \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-12})$$

Une telle approximation est appelée approximation des grandes longueurs d'onde (ou approximation dipolaire).

Si l'on effectue cette approximation dans l'hamiltonien d'interaction $\hat{H}_{I1}$, il vient :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{I1} &= -\frac{q_e}{m_e} \hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) - \frac{q_N}{m_N} \hat{\mathbf{p}}_N \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_N) \\ &\simeq -q \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_e}{m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_N}{m_N} \right] \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \\ &= -\frac{q}{m} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-13})$$

On a utilisé $q_e = -q_N = q$ ainsi que la définition (C-8) de l'impulsion de la particule relative.

Quant à l'hamiltonien $\hat{H}_{I2}$, il devient dans cette approximation :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{I2} &= \frac{q_e^2}{2m_e} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{r}}_e) + \frac{q_N^2}{2m_N} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{r}}_N) \\ &\simeq \frac{q^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-14})$$

Remarque

Pour l'hamiltonien de couplage magnétique de spin $\hat{H}_{I1}^s$ écrit en (C-6), on y remplace également tous les $\hat{\mathbf{r}}_a$ par $\hat{\mathbf{R}}$. Mais ce n'est pas suffisant : il faut ajouter d'autres termes de même ordre, obtenus en incluant les termes du premier ordre en $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_e - \mathbf{R})$ dans $\hat{H}_{I1}$ et $\hat{H}_{I2}$, et représentant des corrections à l'approximation des grandes longueurs d'onde. En effet, un calcul analogue à celui du § 1.d du Complément A_{XIII} montre que ces corrections font apparaître des nouveaux termes d'interaction du même ordre que $\hat{H}_{I1}^s$: interaction entre le moment orbital $\mathbf{L}$ de l'atome et le champ magnétique du rayonnement ; interaction quadrupolaire électrique.

C-4. Hamiltonien dipolaire électrique

Dans le cadre de l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'hamiltonien global du système atome + champ s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} + \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} \left[\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i + \hat{a}_i\hat{a}_i^{\dagger} \right] \quad (\text{C-15})$$

Nous allons effectuer sur cet hamiltonien une transformation unitaire qui conduit à un nouvel hamiltonien d'interaction ne comportant qu'un seul terme, de la forme $-\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$, où $\hat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome :

$$\hat{\mathbf{D}} = q \hat{\mathbf{r}} \quad (\text{C-16})$$

et $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ le champ quantique donné par l'expression (B-3). Ce nouvel hamiltonien d'interaction est appelé *hamiltonien dipolaire électrique*.

Pour trouver la forme de cette transformation unitaire, il est commode de commencer par le cas plus simple où le champ de rayonnement est traité classiquement.

C-4-a. Hamiltonien dipolaire électrique pour un champ classique

Si le champ de rayonnement est traité classiquement, comme un champ extérieur dont la dynamique est imposée de l'extérieur et dont la dépendance temporelle est donc fixée, le dernier terme de (C-15) n'existe pas ; l'opérateur $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$, qui figure dans le second terme doit être remplacé par le champ extérieur $\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$. L'hamiltonien du système s'écrit alors :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} \quad (\text{C-17})$$

Nous cherchons une transformation unitaire qui effectue une translation de $\hat{\mathbf{p}}$ d'une quantité $q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$, de sorte que le second terme de (C-17) se réduise à $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$. Une telle transformation s'écrit :

$$\hat{T}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} q \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \right] \quad (\text{C-18})$$

En effet, on vérifie en utilisant $[\hat{\mathbf{p}}, f(\hat{\mathbf{r}})] = -i\hbar \partial f / \partial \hat{\mathbf{r}}$ et le fait que la variable interne $\hat{\mathbf{r}}$ commute avec la variable externe $\hat{\mathbf{R}}$, que :

$$\hat{T}(t) \hat{\mathbf{p}} \hat{T}^{\dagger}(t) = \hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-19})$$

Les autres termes de (C-17), qui ne dépendent pas de $\hat{\mathbf{p}}$, demeurent inchangés dans la transformation. En revanche, comme cette transformation dépend explicitement du temps via le terme $q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$, le nouvel hamiltonien H' , qui régit l'évolution du nouveau vecteur d'état :

$$|\Psi'(t)\rangle = \hat{T}(t)|\Psi(t)\rangle \quad (\text{C-20})$$

est donné par :

$$\hat{H}'(t) = \hat{T}(t) \hat{H}(t) \hat{T}^{\dagger}(t) + i\hbar \left[\frac{d\hat{T}(t)}{dt} \right] \hat{T}^{\dagger}(t) \quad (\text{C-21})$$

Comme de plus :

$$i\hbar \left[\frac{d\hat{T}(t)}{dt} \right] \hat{T}^\dagger(t) = q\hat{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)}{\partial t} = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-22})$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ est le moment dipolaire électrique de l'atome défini en (C-16), on obtient finalement :

$$\hat{H}'(t) = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_{\text{Coul}} - \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-23})$$

dont le dernier terme a bien la forme attendue pour un hamiltonien dipolaire électrique.

C-4-b. Hamiltonien dipolaire électrique pour un champ quantique

Les résultats précédents suggèrent de considérer la transformation unitaire :

$$\hat{T} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} q \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}) \right] \quad (\text{C-24})$$

où c'est maintenant l'opérateur $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ qui figure dans l'exponentielle. On peut vérifier que cet opérateur est toujours un opérateur de translation pour $\hat{\mathbf{p}}$, de sorte que le second terme de (C-15) se simplifie en $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$.

Comme la transformation (C-24) ne dépend plus explicitement du temps, nous n'avons plus de terme analogue à (C-22). En revanche, il faut étudier la transformation du dernier terme de (C-15) qui représente l'énergie $\hat{H}_R$ du champ transverse quantique. Pour cela, il est commode de ré-écrire l'expression (C-24) en utilisant le développement (B-5) de $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ en $\hat{a}_i$ et $\hat{a}_i^\dagger$:

$$\hat{T} = \exp \left[\sum_i \left(\lambda_i^* \hat{a}_i - \lambda_i \hat{a}_i^\dagger \right) \right] \quad (\text{C-25})$$

avec :

$$\lambda_i = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0 \hbar \omega_i L^3}} \boldsymbol{\epsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} \quad (\text{C-26})$$

Sous cette forme, l'opérateur $\hat{T}$ apparaît comme un opérateur de translation, car il satisfait aux équations :

$$\hat{T} \hat{a}_j \hat{T}^\dagger = \hat{a}_j + \lambda_j \quad \hat{T} \hat{a}_j^\dagger \hat{T}^\dagger = \hat{a}_j^\dagger + \lambda_j^* \quad (\text{C-27})$$

Pour démontrer (C-27), on peut utiliser (Complément B_{II}, § 5 d) l'identité :

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \quad (\text{C-28})$$

valable si A et B commutent avec leur commutateur $[A, B]$, ainsi que la relation de commutation $[\hat{a}, f(\hat{a}^\dagger)] = \partial f / \partial \hat{a}^\dagger$. La transformation du dernier terme de (C-15) donne donc :

$$\hat{T} \hat{H}_R \hat{T}^\dagger = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \left[(\hat{a}_i + \lambda_i)(\hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^*) + (\hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^*)(\hat{a}_i + \lambda_i) \right] \quad (\text{C-29})$$

Les termes du second membre de (C-29) indépendants de λ_i et λ_i^* redonnent $\hat{H}_R$. Les termes linéaires en λ_i et λ_i^* donnent :

$$\begin{aligned} \sum_i \hbar \omega_i \left(\lambda_i \hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^* \hat{a}_i \right) &= - \sum_i i \sqrt{\frac{\hbar \omega_i}{2 \epsilon_0 L^3}} \left(\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} \right) \cdot \hat{\mathbf{D}} \\ &= - \hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{D}} \end{aligned} \quad (\text{C-30})$$

où l'on a utilisé (B-3). On retrouve ainsi la forme dipolaire électrique de l'hamiltonien d'interaction :

$$\hat{H}_I = - \hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{D}} \quad (\text{C-31})$$

Enfin, les termes quadratiques en λ_i et λ_i^* introduisent un terme que nous noterons $\hat{h}_{\text{dip}}$:

$$\hat{h}_{\text{dip}} = \sum_i \hbar \omega_i \lambda_i^* \lambda_i = \sum_i \frac{1}{2 \epsilon_0 L^3} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} \right)^2 \quad (\text{C-32})$$

qui représentent une énergie dipolaire propre de l'atome.

Finalement, le regroupement de tous les termes précédents donne pour l'hamiltonien transformé :

$$\hat{H}' = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_{\text{Coul}} + \hat{H}_R - \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) + \hat{h}_{\text{dip}} \quad (\text{C-33})$$

Nous retrouvons donc bien une forme semblable à (C-23), avec en plus un terme $\hat{h}_{\text{dip}}$.

Remarques :

- (i) Un même opérateur mathématique ne décrit pas la même grandeur physique dans deux représentations qui se déduisent l'une de l'autre par une transformation unitaire. En particulier, l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ apparaissant dans (C-31) ne représente plus le champ électrique transverse dans le nouveau point de vue, qui serait le transformé par $\hat{T}$ de $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$; ce serait donc $\hat{T} \hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) \hat{T}^\dagger$, qui diffère de $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$. En fait, on peut montrer que l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ représente dans le nouveau point de vue la grandeur physique $\hat{\mathfrak{D}}(\hat{\mathbf{R}})/\epsilon_0$ où $\hat{\mathfrak{D}}(\hat{\mathbf{R}})$ est l'induction électrique (voir Complément A_{IV} de [15]).
- (ii) L'expression de l'énergie propre dipolaire $\hat{h}_{\text{dip}}$ est donnée par une intégrale en k , qui est divergente à l'infini. Il faut toutefois limiter cette intégrale aux valeurs de k pour lesquelles l'approximation des grandes longueurs d'onde est valable.

C-5. Éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction ; règles de sélection

Considérons un état initial où l'atome est dans l'état interne $|\psi_{\text{in}}^{\text{int}}\rangle$, dans l'état externe $|\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}\rangle$, et où le rayonnement est dans l'état $|\psi_{\text{in}}^R\rangle$. L'hamiltonien d'interaction (C-31) couple cet état initial à un état final où les variables atomiques internes, externes et les variables de rayonnement sont dans les états $|\psi_{\text{fin}}^{\text{int}}\rangle$, $|\psi_{\text{fin}}^{\text{ext}}\rangle$, et $|\psi_{\text{fin}}^R\rangle$, respectivement. Comme l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ qui figure dans (C-31) est une superposition linéaire d'opérateurs d'annihilation $\hat{a}_i$ et de création $\hat{a}_i^\dagger$, l'élément de matrice de $\hat{H}_I$ décrit deux types de processus : les processus d'absorption associés à l'opérateur $\hat{a}_i$ au cours desquels un photon disparaît et les processus d'émission associés à

l'opérateur $\hat{a}_i^\dagger$ au cours desquels un photon nouveau apparaît. Cet élément de matrice se factorise en un produit de trois éléments de matrice relatifs aux trois types de variables qui s'écrivent, pour les processus d'absorption :

$$i\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}} \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{int}} | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} | \psi_{\text{in}}^{\text{int}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^R | \hat{a}_i | \psi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{C-34})$$

et pour les processus d'émission :

$$-i\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}} \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{int}} | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} | \psi_{\text{in}}^{\text{int}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(-i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^R | \hat{a}_i^\dagger | \psi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{C-35})$$

Le terme central de ces expressions est un élément de matrice faisant intervenir les variables atomiques externes ; il exprime la conservation de l'impulsion globale. En effet, l'opérateur $\exp(\pm i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}})$ est un opérateur de translation de l'impulsion, d'une quantité $\pm \hbar \mathbf{k}_i$. Si le centre de masse de l'atome a une impulsion initiale $\hbar \mathbf{K}_{\text{in}}$, après l'absorption du photon $\mathbf{k}_i$ son impulsion finale sera égale à $\hbar \mathbf{K}_{\text{fin}} = \hbar \mathbf{K}_{\text{in}} + \hbar \mathbf{k}_i$; l'impulsion $\hbar \mathbf{k}_i$ du photon absorbé est donc gagnée par l'atome lors de ce processus d'absorption. On montre de même que l'impulsion de l'atome diminue d'une quantité $\hbar \mathbf{k}_i$ lors de l'émission d'un photon.

Dans le premier élément de matrice de (C-34), qui fait intervenir les variables atomiques internes, l'opérateur $\hat{\mathbf{D}}$ est un opérateur impair. L'élément de matrice n'est donc différent de zéro que si les états atomiques internes initial et final ont des parités opposées, ce qui est par exemple le cas des états $1s$ et $2p$ de l'atome d'hydrogène. Nous retrouvons ici une deuxième loi de conservation, la conservation de la parité. De plus, l'opérateur $\hat{\mathbf{D}}$ est un opérateur vectoriel, ce qui entraîne des règles de sélection sur le moment cinétique interne, qui seront étudiées dans le Complément C_{XIX}.

Remarques

- (i) La conservation de l'impulsion globale apparaît sur l'élément de matrice central des expressions (C-34) et (C-35). On peut se demander si ce résultat n'est valable que pour la forme approchée (C-31) de l'hamiltonien d'interaction utilisée pour établir ces équations. En fait on peut montrer, à partir des relations de commutation $[\mathbf{p}_a, F(\mathbf{r}_a)] = -i\hbar \partial F / \partial \mathbf{r}_a$ et $[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \hat{a}_i] = -\hat{a}_i$, que l'hamiltonien d'interaction $\hat{H}_{I1}$ écrit en (C-4) (sans approximation des grandes longueurs d'onde) commute avec l'impulsion totale du système $\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a + \sum_i \hbar \mathbf{k}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$. Le même résultat est valable pour tous les autres termes de l'hamiltonien d'interaction. Ceci entraîne que l'hamiltonien d'interaction exact n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre états de même impulsion totale. La relation de commutation de l'impulsion totale avec tous les termes de l'hamiltonien traduit l'invariance du système total par translation spatiale. Les propriétés de ce système ne changent pas si l'on translate de la même quantité les particules et les champs. Des considérations analogues s'appliquent à l'invariance par rotation et entraînent que l'hamiltonien d'interaction ne peut relier que des états de même moment cinétique total. Ces résultats sont importants pour comprendre simplement les échanges d'impulsion et de moment cinétique entre atomes et photons, qui sont discutés dans les Compléments A_{XIX} et C_{XIX}.
- (ii) La conservation de l'impulsion totale lors du processus d'absorption, combinée à la conservation de l'énergie totale, permet de montrer que l'énergie du photon absorbé diffère de l'énergie séparant les deux niveaux internes entre lesquels

s'effectue la transition. Deux effets sont responsables de cette différence : l'effet Doppler et l'effet de recul (Complément A_{XIX}) ; ils jouent un rôle important dans les méthodes de refroidissement laser.

- (iii) Si l'on pousse les calculs au-delà de l'approximation des grandes longueurs d'onde, on trouve qu'il faut ajouter à l'hamiltonien d'interaction des termes décrivant l'interaction entre le champ magnétique du rayonnement et les moments magnétiques orbital ou de spin des atomes. Une partie de ces termes a déjà été donnée en (C-6). Des transitions, appelées dipolaires magnétiques, peuvent alors apparaître entre niveaux de même parité, contrairement aux transitions dipolaires électriques étudiées plus haut. D'autres types de transition peuvent également apparaître à ces ordres supérieurs, comme les transitions quadrupolaires.

Notons enfin que si l'état initial du rayonnement contient n_i photons, les deux derniers éléments de matrice de (C-34) et (C-35) valent $\langle n_i - 1 | \hat{a}_i | n_i \rangle = \sqrt{n_i}$ et $\langle n_i + 1 | \hat{a}_i^\dagger | n_i \rangle = \sqrt{n_i + 1}$. En présence de n_i photons incidents, la probabilité du processus d'absorption est donc proportionnelle à n_i alors que la probabilité d'émission est proportionnelle à $n_i + 1$. Nous verrons dans le Chapitre XX que cette différence est liée à l'existence de deux types d'émission, l'émission induite et l'émission spontanée.

Connaissant les expressions des divers hamiltoniens $\hat{H}_A$, $\hat{H}_R$ et $\hat{H}_I$, ainsi que leurs éléments de matrice, nous pouvons maintenant résoudre l'équation de Schrödinger pour calculer les amplitudes de transition entre un état initial et un état final du système "atome + champ". Ce sera l'objet du chapitre suivant consacré à l'étude de divers processus, comme l'absorption ou l'émission de photons dans un rayonnement monochromatique ou de bande spectrale large, la photo-ionisation, les processus multiphotoniques, la diffusion de photons.