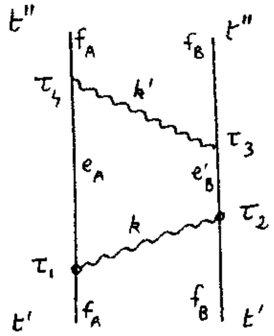
4.3.75

Interaction entre 2 atomes neutres par échange de photons - Effets de retard. (Suite du §IB)

② Quelques considérations simples sur les diagrammes.

a) Autre manière de "lire" les diagrammes du tableau I

Fig 3



Revenons au diagramme 19 par exemple. Au lieu de raisonner sur le système global, on peut se fixer sur chaque particule et la suivre au cours du temps. Pour cela, on regroupe les facteurs d'évolution libre relatifs à chaque particule.

Par exemple, pour A, les 3 facteurs d'évolution $e^{-iE_e(\tau_2-\tau_1)/\hbar}$, $e^{-iE_e(\tau_3-\tau_2)/\hbar}$, $e^{-iE_e(\tau_4-\tau_3)/\hbar}$ qui apparaissaient dans les 3 intervalles de temps $\tau_1 \leftrightarrow \tau_2$, $\tau_2 \leftrightarrow \tau_3$, $\tau_3 \leftrightarrow \tau_4$ se regroupent en $e^{-iE_e(\tau_4-\tau_1)/\hbar}$ pour décrire la propagation de A entre τ_1 et τ_4.

On peut donc "lire" le diagramme 19 de la manière suivante :

A se propage librement de t' à τ_1, émet un photon $\vec{k}\vec{\varepsilon}$, se propage librement de τ_1 à τ_4, absorbe un photon $\vec{k}'\vec{\varepsilon}'$, se propage librement de τ_4 à t''

B se propage librement de t' à τ_2, absorbe un photon $\vec{k}\vec{\varepsilon}$, se propage librement de τ_2 à τ_3, émet un photon $\vec{k}'\vec{\varepsilon}'$, se propage librement de τ_3 à t''

Le photon $\vec{k}\vec{\varepsilon}$ se propage librement de τ_1 à τ_2 entre l'émission par A et l'absorption par B

" " $\vec{k}'\vec{\varepsilon}'$ " " τ_3 " τ_4 " B " " A

Ainsi tout diagramme apparait comme constitué de lignes associées à la propagation libre des diverses particules. Ces lignes se rejoignent en un certain nombre de vertex décrivant des processus élémentaires d'interaction.

b) Lignes entrantes, sortantes, internes.

- Lignes entrantes.

Associées aux états initiaux des particules. Sur la figure 3, ce sont les 2 lignes f_A et f_B partant de t' et arrivant à τ_1 et τ_2.

Le facteur d'évolution libre associé à f_A est $e^{-iE_f(\tau_1-t')/\hbar}$. En fait, comme on est en représentation d'interaction, le facteur $e^{iE_f t'/\hbar}$ se simplifie avec un terme analogue provenant de $e^{-iH_0 t'/\hbar}$ [cf formule VIII-6] et il reste $e^{-iE_f\tau_1/\hbar}$

D'où la règle pour trouver le facteur d'évolution libre associé à la ligne entrante d'une particule :

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \times \text{Energie de la particule entrante} \times \text{temps associé au vertex où la ligne entrante vient aboutir}\right] \qquad (XI\text{-}1)$$

- Lignes sortantes.

Associées aux états finaux des particules. Sur la figure 3, ce sont les 2 lignes f_A et f_B partant de τ_3 et τ_4 et aboutissant à t''.

Facteur d'évolution libre :

$$\exp\left[+\frac{i}{\hbar} \times \text{Energie de la particule sortante} \times \text{temps associé au vertex d'où la ligne sortante part}\right] \qquad (XI\text{-}2)$$

- *Lignes internes*

Associées à un état intermédiaire. Comprises entre 2 vertex. Sur la figure 3, il y a 4 lignes internes, 2 pour les photons $\vec{k}\vec{\varepsilon}$ et $\vec{k}'\vec{\varepsilon}'$ et 2 pour les particules (A entre τ_1 et τ_4, B entre τ_2 et τ_3)

La particule associée à une ligne interne n'apparait que de manière transitoire et ne se retrouve ni dans l'état initial ni dans l'état final. On dit parfois dans la terminologie de l'Electrodynamique Quantique qu'elle est "virtuelle". Ainsi, le diagramme 19 de la figure 3 décrit un échange de 2 photons virtuels entre les 2 atomes. (Dans l'autre manière de lire le diagramme, discutée page X-8, on parle de "transitions virtuelles" vers des états intermédiaires)

Sur une ligne interne, la particule considérée se propage dans tous les états libres possibles. Il faut donc sommer sur toutes ces possibilités. Par exemple pour le diagramme 19, il faut sommer sur toutes les polarisations $\vec{\varepsilon}$ et sur tous les vecteurs d'onde $\vec{k}$ du photon k qui se propage de τ_1 à τ_2.

Le facteur d'évolution libre associé à une ligne interne est donc moins simple que pour une ligne entrante ou sortante.

c) Propagateur.

Le propagateur d'une particule est le facteur d'évolution libre associé à une ligne interne de la particule considérée.

Pour définir entièrement le propagateur d'une particule, il faut de plus préciser les conditions aux limites auxquelles il satisfait.

- *Pour l'atome*, nous interdirons comme dans le § A-2 page VIII-2, au propagateur de pouvoir retourner dans le passé. Par exemple, pour le diagramme 19 de la figure 3, nous prendrons comme propagateur de la particule A entre τ_1 et τ_4 (H_A est l'hamiltonien de A) :

$$e^{-iH_A(\tau_4-\tau_1)/\hbar}\ \theta(\tau_4-\tau_1) \qquad (XI-3)$$

ce qui nous permettra ensuite d'intégrer indépendamment sur τ_4 et τ_1 (la condition $\tau_4 \geq \tau_1$ étant automatiquement satisfaite grace à $\theta(\tau_4-\tau_1)$).

En introduisant comme en VIII-13 la T.F. de θ, on peut écrire (XI-3) sous la forme plus commode suivante :

$$-\frac{1}{2\pi i}\lim_{\eta\to 0_+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-iE(\tau_4-\tau_1)/\hbar}}{E+i\eta-H_A} \qquad (XI-4)$$

- *Pour le photon*, nous allons prendre des conditions aux limites différentes (conditions aux limites de Feynman), que nous allons expliciter au § suivant, et qui vont nous permettre de mener les calculs plus simplement.

d) Vertex.

A chaque vertex est associé un facteur $\frac{V}{i\hbar}$ où V est l'hamiltonien d'interaction. [le $i\hbar$ provient du développement en perturbations de l'opérateur d'évolution cf équation VIII-2].

③ Propagateur du photon (Hamiltonien $-\vec{D}.\vec{\mathbb{E}}$).

Nous allons établir une expression du propagateur du photon qui englobe les 2 possibilités schématisées par les figures 4a et 4b.

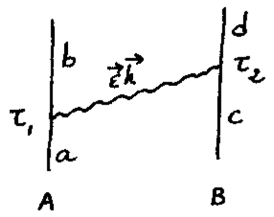


Fig 4-a

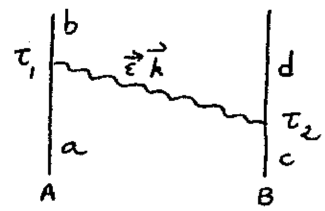


Fig 4b

a) Cas $\tau_2 > \tau_1$ (figure 4-a)

– Amplitude d'émission d'un photon $\vec{k}\vec{\varepsilon}$ à l'instant τ_1 par l'atome A situé en $\vec{R}_A$ et passant de a à b.

$$\frac{1}{i\hbar} \langle b,\vec{k}\vec{\varepsilon}\,|-\vec{D}_A.\vec{\mathbb{E}}(\vec{R}_A)\,|a,0\rangle = \frac{1}{i\hbar}(-1)(-i)\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3}}\; e^{-i\vec{k}.\vec{R}_A}\; e\sum_i \varepsilon_i\,(r_{Ai})_{ba} \qquad (XI\text{-}5)$$

– Amplitude d'absorption de ce photon à τ_2 par B situé en $\vec{R}_B$ et passant de c à d.

$$\frac{1}{i\hbar}\langle d,0|-\vec{D}_B\,\vec{\mathbb{E}}(\vec{R}_B)\,|c,\vec{k}\vec{\varepsilon}\rangle = \frac{1}{i\hbar}(-1)(i)\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3}}\; e^{i\vec{k}\vec{R}_B}\; e\sum_j \varepsilon_j\,(r_{Bj})_{dc} \qquad (XI\text{-}6)$$

– Facteur de phase dû à l'évolution libre du photon $\vec{k}\vec{\varepsilon}$ entre τ_1 et τ_2

$$e^{-i\omega(\tau_2-\tau_1)} \qquad \text{avec} \quad \omega = c|\vec{k}| \qquad (XI\text{-}7)$$

– Regroupement de toutes les quantités.

$$\sum_{i,j}\underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 e^2\,(r_{Ai})_{ba}(r_{Bj})_{dc}}_{\text{Contribution des 2 Vertex}} \quad \underbrace{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 L^3}\;\varepsilon_i\,\varepsilon_j\; e^{i\left[\vec{k}.(\vec{R}_B-\vec{R}_A)-\omega(\tau_2-\tau_1)\right]}}_{\text{Propagation du photon } \vec{k}\vec{\varepsilon}} \qquad (XI\text{-}8)$$

Il faut maintenant sommer sur $\vec{\varepsilon}$ et sur $\vec{k}$ le terme relatif au photon.

– Sommation sur les polarisations $\vec{\varepsilon}$, à $\vec{k}$ fixé.

$$\sum_{\vec{\varepsilon}\perp\vec{k}} \varepsilon_i\,\varepsilon_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \qquad (XI\text{-}9)$$

– Sommation sur $\vec{k}$ (Remplacement de la somme discrète par une intégrale).

En effectuant cette sommation, on obtient le propagateur du photon correspondant au diagramme 4-a.

$$\int d^3k\;\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0(2\pi)^3}\left(\delta_{ij}-\frac{k_ik_j}{k^2}\right)e^{i\left[\vec{k}.(\vec{R}_B-\vec{R}_A)-\omega(\tau_2-\tau_1)\right]} \qquad \text{avec} \begin{cases}\omega = c|\vec{k}|\\ \tau_2>\tau_1\end{cases} \qquad (XI\text{-}10)$$

Noter que le propagateur est un objet à 2 indices, ou encore un tenseur d'ordre 2 ("dyadic"), qu'il faudra ensuite contracter avec les 2 vecteurs $(r_{Ai})_{ba}$ et $(r_{Bj})_{dc}$ associés aux 2 vertex que le propagateur du photon relie.

b) Cas $\tau_1 > \tau_2$ (figure 4b)

Les calculs sont identiques à condition

– de remplacer $(-i)\,e^{-i\vec{k}.\vec{R}_A}$ par $(i)\,e^{i\vec{k}.\vec{R}_A}$ dans XI-5 (Photon absorbé par A et non émis)

– de remplacer $(i)\,e^{i\vec{k}.\vec{R}_B}$ par $(-i)\,e^{-i\vec{k}.\vec{R}_B}$ dans XI-6 (Photon émis par B et non absorbé)

– de remplacer $(\tau_2-\tau_1)$ par $(\tau_1-\tau_2)$ dans XI-7 (Evolution de τ_2 à τ_1 et non de τ_1 à τ_2)

Finalement, il suffit de changer globalement le signe de l'argument de l'exponentielle de XI-10. Effectuons alors le changement de variables $\vec{k}\to-\vec{k}$ dans l'intégrale sur $\vec{k}$. $\int d^3k \to \int d^3k$ et on obtient finalement pour le propagateur du photon associé à 4-b.

$$\int d^3k\;\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0(2\pi)^3}\left(\delta_{ij}-\frac{k_ik_j}{k^2}\right)e^{i\left[\vec{k}.(\vec{R}_B-\vec{R}_A)+\omega(\tau_2-\tau_1)\right]} \qquad \text{avec} \begin{cases}\omega = c|\vec{k}|\\ \tau_2<\tau_1\end{cases} \qquad (XI\text{-}11)$$

Peut-on maintenant regrouper (XI-10) et (XI-11) en une seule formule qui redonne (XI-10) pour $\tau_2 > \tau_1$ et (XI-11) pour $\tau_2 < \tau_1$.

c) <u>Formule unique englobant les 2 cas précédents.</u>

– Elle repose sur l'identité suivante :

$$-\frac{1}{2\pi i}\, 2|\vec{k}| \lim_{\varepsilon \to 0_+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ick_0(\tau_2-\tau_1)}}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon}\, dk_0 = \begin{cases} e^{-ic|\vec{k}|(\tau_2-\tau_1)} & \text{si } \tau_2 > \tau_1 \\ e^{ic|\vec{k}|(\tau_2-\tau_1)} & \text{si } \tau_2 < \tau_1 \end{cases} \qquad \text{(XI-12)}$$

Pour démontrer (XI-12) il suffit d'effectuer la intégrale sur k_0 par la méthode des résidus et de remarquer que le dénominateur du 1er membre de (XI-12) s'écrit $\left(k_0 - |\vec{k}| + \frac{i\varepsilon}{2|\vec{k}|}\right)\left(k_0 + |\vec{k}| - \frac{i\varepsilon}{2|\vec{k}|}\right)$. Il y a donc 2 pôles en $\pm |\vec{k}| \mp i\frac{\varepsilon}{2|\vec{k}|}$.

$\tau_2 > \tau_1$

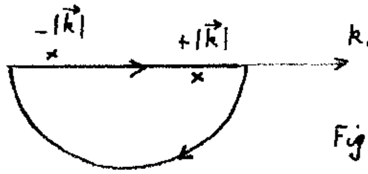


Fig 5a

$\tau_2 < \tau_1$

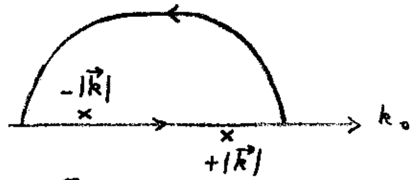


Fig 5 b

Pour $\tau_2 - \tau_1 > 0$, il faut fermer le contour vers le bas ($\mathrm{Im}\, k_0$ doit être < 0 pour que la contribution du $\frac{1}{2}$ cercle soit nulle), et seul le résidu du pôle $|\vec{k}| - \frac{i\varepsilon}{2|\vec{k}|}$ intervient. Pour $\tau_2 - \tau_1 < 0$, il faut fermer le contour vers le haut et seul le résidu de l'autre pôle $-|\vec{k}| + i\frac{\varepsilon}{2|\vec{k}|}$ intervient). On démontre ainsi aisément (XI-12).

– (XI-10) et (XI-11) sont donc regroupables, grâce à XI-12, en une formule unique qui donne le propagateur de Feynman du photon $D^F_{ij}(\vec{R}_A\tau_1, \vec{R}_B\tau_2)$ reliant les 2 points d'espace temps $\vec{R}_A\,\tau_1$ et $\vec{R}_B\,\tau_2$:

$$D^F_{ij}(\vec{R}_A\tau_1, \vec{R}_B\tau_2) = i\hbar \frac{c}{\varepsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 \left(|\vec{k}|^2 \delta_{ij} - k_i k_j\right) \frac{e^{i\left[\vec{k}\cdot(\vec{R}_B - \vec{R}_A) - ck_0(\tau_2-\tau_1)\right]}}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon} \qquad \text{(XI-13)}$$

En fait, on voit immédiatement sur (XI-13) que la transformée de Fourier spatio-temporelle de D^F_{ij} est

$$G^F_{ij}(\vec{k}, k_0) = i\hbar \frac{c}{\varepsilon_0} \left(|\vec{k}|^2 \delta_{ij} - k_i k_j\right) \frac{1}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon} \qquad \text{(XI-14)}$$

– Enfin, il ressort clairement de (XI-12) que les conditions aux limites définissant le propagateur de Feynman D^F_{ij} du photon sont les suivantes. A la différence du propagateur atomique défini en XI-3, D^F_{ij} peut se propager dans le futur <u>et</u> dans le passé, mais il n'utilise pour se propager dans le futur que des fréquences positives, et dans le passé que des fréquences négatives.

<u>Remarques</u>

(i) les mêmes conditions aux limites appliquées par Feynman au propagateur de l'équation de Dirac lui ont permis de bâtir une théorie très simple et très élégante du positron, cette particule apparaissant dans cette théorie comme un électron se propageant dans le passé et utilisant les seuls états d'énergie < 0 solutions de l'équation de Dirac.

(ii) L'intérêt fondamental des conditions aux limites de Feynman tient à leur caractère relativiste. Les 2 diagrammes 4a et 4b diffèrent par l'ordre temporel des 2 événements $\vec{R}_A \tau_1$ et $\vec{R}_A \tau_2$. Si l'intervalle d'espace temps qui sépare ces 2 événements est du genre espace, l'antériorité d'un événement par rapport à l'autre n'a rien d'absolu. 2 observateurs galiléens pourront décrire le même processus physique, l'un par un diagramme du type 4-a, l'autre par un diagramme du type 4-b. Il est donc satisfaisant d'avoir un propagateur qui englobe ces 2 possibilités.

d) Intérêt pratique du propagateur de Feynman des photons.

Comme on ne se préoccupe plus de l'ordre de τ_2 et τ_1, on peut par la suite intégrer indépendamment sur ces 2 temps.

De plus, on se convainc aisément que les 6 diagrammes 16 → 21 du tableau I se déduisent du diagramme unique 6a en changeant de manière continue sur ce diagramme l'ordre relatif des 4 temps $\tau_1\ \tau_2\ \tau_3\ \tau_4$ qui peuvent varier maintenant de manière indépendante. Ils sont donc tous contenus dans le diagramme 6a où l'on utilise des conditions aux limites de Feynman pour les propagateurs des 2 photons.

De même, tous les 6 diagrammes 22 → 27 du tableau I sont contenus dans le diagramme 6b.

Nous appellerons pour simplifier 6a et 6b diagramme direct et diagramme croisé.

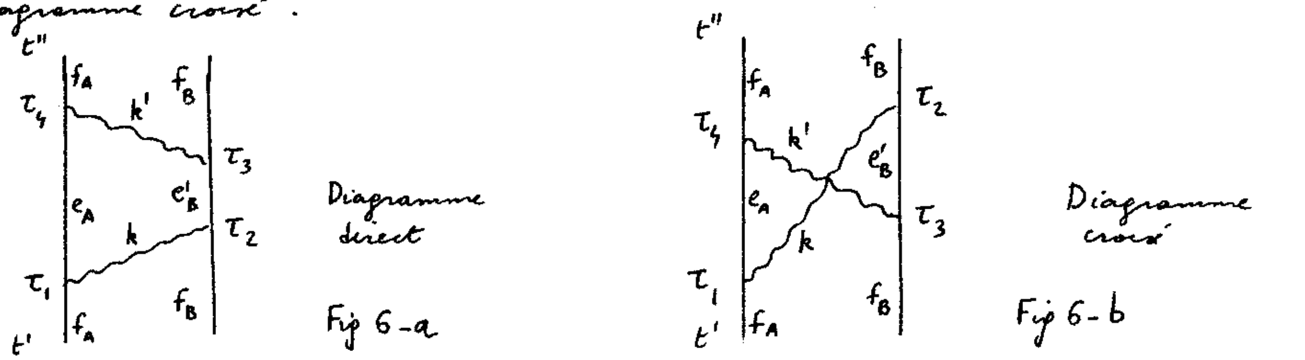


Fig 6-a

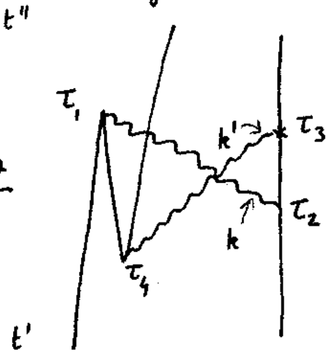
Fig 6-b

En conclusion, si l'on prend l'hamiltonien d'interaction $-\vec{D}_A\cdot\vec{E}(\vec{R}_A) - \vec{D}_B\cdot\vec{E}(\vec{R}_B)$ et si l'on utilise les conditions aux limites de Feynman pour le propagateur du photon, on a ramené le calcul de $\langle \varphi_0 | \tilde{U}(t'',t') | \varphi_0 \rangle$, et par suite d'après (X-17) et (X-22) celui de ΔE, au calcul des 2 seuls diagrammes direct et croisé de la figure 6.

Remarque.

On ne peut pas obtenir l'un des 6 diagrammes 22→27 du tableau I par déformation de 6-a. On pourrait croire qu'en déformant 6-a de manière à avoir $\tau_4 < \tau_1$, on obtient un des 6 diagrammes croisés.

Fig 7



En fait, en procédant ainsi on obtient le diagramme de la fig 7 qui est distinct des 6 diagrammes 22 → 27 (et qui de plus donne une contribution nulle d'après les conditions aux limites prises pour le propagateur atomique XI-3).

e) Transformée de Fourier temporelle du propagateur.

Comme $\vec{R}_A$ et $\vec{R}_B$ sont supposés ici fixes et qu'on n'a pas ultérieurement à intégrer sur $\vec{R}_A$ et sur $\vec{R}_B$, il vaut mieux effectuer tout de suite l'intégrale sur $\vec{k}$ dans la formule XI-13. (Par contre, nous ne ferons pas l'intégrale sur k_0 de suite. Les intégrales sur τ_1 et τ_2 qui apparaitront plus tard introduiront en effet des fonctions δ qui simplifieront les calculs).

– Si l'on pose
$$\vec{R} = \vec{R}_B - \vec{R}_A \tag{XI-15}$$
on obtient pour l'intégrale sur k de XI-13 :
$$\int d^3k\, \frac{|\vec{k}|^2\delta_{ij} - k_i k_j}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon}\, e^{i\vec{k}.\vec{R}} = \delta_{ij}\int d\Omega \int_0^\infty \frac{|\vec{k}|^4\, dk}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon}\, e^{i\vec{k}.\vec{R}} + \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_j}\int d\Omega \int_0^\infty \frac{|\vec{k}|^2\, dk}{k_0^2 - |\vec{k}|^2 + i\varepsilon}\, e^{i\vec{k}.\vec{R}} \tag{XI-16}$$

– Intégrale sur les angles (θ : angle entre $\vec{R}$ et $\vec{k}$)
$$\int d\Omega\, e^{i\vec{k}.\vec{R}} = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, e^{i|\vec{k}|R\cos\theta} = \frac{2\pi}{i|\vec{k}|R}\left(e^{i|\vec{k}|R} - e^{-i|\vec{k}|R}\right) \tag{XI-17}$$

– Reportons (XI-17) dans (XI-16) et étendons la borne inférieure de l'intégrale sur k de 0 à $-\infty$ (en utilisant les propriétés de parité des fonctions à intégrer). Il vient :
$$-2\pi i\left[\frac{1}{R}\delta_{ij}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k^3 e^{ikR}}{k_0^2 - k^2 + i\varepsilon}\, dk + \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_j}\frac{1}{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{k\, e^{ikR}}{k_0^2 - k^2 + i\varepsilon}\, dk\right] \tag{XI-18}$$

– Les 2 intégrales sur k s'effectuent par la méthode des résidus. On met le dénominateur sous la forme $\left(|k_0| - k + \frac{i\varepsilon}{2k}\right)\left(|k_0| + k - \frac{i\varepsilon}{2k}\right)$. Il y a donc 2 pôles en $k = |k_0| + \frac{i\varepsilon}{2k} \simeq |k_0| + \frac{i\varepsilon}{2|k_0|}$ et $k = -|k_0| + \frac{i\varepsilon}{2k} \simeq -|k_0| - \frac{i\varepsilon}{2|k_0|}$. Comme $R > 0$, il faut fermer le contour vers le haut ($\mathrm{Im}\, k > 0$). Seul le résidu au pôle $k = |k_0| + \frac{i\varepsilon}{2|k_0|}$ intervient, et on obtient :
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{k\, e^{ikR}}{k_0^2 - k^2 + i\varepsilon}\, dk = -i\pi\, e^{i|k_0|R} \tag{XI-19-a}$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{k^3 e^{ikR}}{k_0^2 - k^2 + i\varepsilon}\, dk = -i\pi |k_0|^2 e^{i|k_0|R} \tag{XI-19-b}$$

– En portant (XI-19) dans (XI-18), en effectuant les 2 dérivations par rapport à R_i et R_j, et en reportant le résultat ainsi obtenu pour l'intégrale sur $\vec{k}$ dans (XI-13), on obtient finalement :
$$D^F_{ij}(\vec{R}_A\tau_1, \vec{R}_B\tau_2) = -\frac{1}{2}\,\frac{i\hbar c}{\varepsilon_0(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_0\, e^{-ick_0(\tau_2-\tau_1)}\, g^F_{ij}(k_0, R) \tag{XI-20}$$
avec
$$g^F_{ij}(k_0,R) = e^{i|k_0|R}\,|k_0|^3\left[\frac{1}{|k_0|R}\left(\delta_{ij} - \frac{R_iR_j}{R^2}\right) + \frac{i}{|k_0|^2R^2}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right) - \frac{1}{|k_0|^3R^3}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right)\right] \tag{XI-21}$$

$g^F_{ij}(k_0, R)$ est une fonction paire de k_0.

Interprétation physique

Si l'on considère en $\vec{R}_A$ un dipôle D_{Ai} oscillant à la fréquence ck_0 (variant en e^{-ick_0t}), (XI-21) donne, à un facteur près, l'amplitude complexe du champ E_j rayonné par ce dipôle en $\vec{R}_B$. Ce champ est une somme de 3 termes décroissant respectivement en $1/R^3$, $1/R^2$, $1/R$. Le facteur e^{ik_0R} représente un déphasage correspondant au temps de propagation fini du rayonnement entre $\vec{R}_A$ et $\vec{R}_B$.

Si $k_0R \ll 1$, e^{ik_0R} est très voisin de 1, le terme en $1/R^3$ est prépondérant et (XI-21) se réduit à

$$-\frac{1}{R^3}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right) \qquad (XI-22)$$

c-à-d au champ électrostatique instantané d'un dipole. C'est ce point qui permet de comprendre comment l'hamiltonien $-\vec{D}_A\cdot\vec{E}(\vec{R}_A) - \vec{D}_B\,\vec{E}(\vec{R}_B)$ peut redonner le résultat de la théorie de London pour des atomes suffisamment proches.

Si $k_0R \gg 1$, (XI-21) se réduit au terme en $1/R$

$$k_0^2\,\frac{e^{ik_0R}}{R}\left(\delta_{ij} - \frac{R_iR_j}{R^2}\right) \qquad (XI-23)$$

On reconnait le champ rayonné au loin par un dipole oscillant.

(4) Propagateur du photon transverse (hamiltonien $-\frac{e}{m}\vec{p}\cdot\vec{A}$)

Soit $\tilde{D}^F_{ij}$ le propagateur associé à l'hamiltonien $-\frac{e}{m}\vec{p}\cdot\vec{A}$. Le calcul d'un propagateur englobant les 2 possibilités représentées sur les figures 4a et 4b est très analogue au précédent. Les modifications sont les suivantes :

- Il faut dans (XI-8) remplacer $(r_{Ai})_{ba}(r_{Bj})_{dc}$ par $\left(\frac{P_{Ai}}{m}\right)_{ba}\left(\frac{P_{Bj}}{m}\right)_{dc}$
- Comme $\vec{A}$ est $\frac{1}{\omega}$ fois plus petit que $\vec{E}$, il faut diviser XI-8 par ω^2, ce qui revient ultérieurement à diviser par $\omega^2 = c^2|\vec{k}|^2$ (XI-14) de même que les 2 quantités figurant dans les 2 intégrales sur k de (XI-16).

La 1ère intégrale de (XI-18) devient donc, à un facteur $\frac{1}{c^2}$ près, égale à (XI-19-a)

$$-\frac{i\pi}{c^2}\,e^{i|k_0|R} \qquad (XI-24)$$

Pour la seconde, revenons à (XI-16). Le 2ème terme de (XI-16) devient, compte tenu de (XI-17) :

$$-\frac{2\pi i}{c^2}\,\frac{\partial^2}{\partial R_i\partial R_j}\,\frac{1}{R}\int_0^\infty \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k(k_0^2 - k^2 + i\varepsilon)}\,dk \qquad (XI-25)$$

On voit que le dénominateur de (XI-25) s'annule également maintenant en $k=0$ (la division par c^2k^2 a fait passer 1 facteur k du numérateur au dénominateur). En fait, comme le numérateur s'annule également en $k=0$, il n'y a pas de singularité en $k=0$. On peut donc intégrer de ε' (ε' infiniment petit >0) à $+\infty$ au lieu de 0 à $+\infty$, ou, ce qui revient au même, remplacer $\frac{1}{k}$ par

$$\frac{1}{k} \longrightarrow \lim_{\varepsilon'\to 0_+} \frac{k}{k^2+\varepsilon'^2} = \lim_{\varepsilon'\to 0_+} \frac{1}{2}\left[\frac{1}{k+i\varepsilon'} + \frac{1}{k-i\varepsilon'}\right] \qquad (XI-26)$$

(L'erreur commise lors de ce remplacement tend vers 0 comme ε'). Si dans le terme en e^{-ikR}, on fait le changement de variable $k\to -k$, on obtient en regroupant ce terme avec l'autre dans l'intégrale en k de XI-25

$$\int_0^\infty \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k(k_0^2-k^2+i\varepsilon)}\,dk = \frac{1}{2}\lim_{\varepsilon'\to 0_+}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikR}}{(k_0^2-k^2+i\varepsilon)}\left[\frac{1}{k+i\varepsilon'} + \frac{1}{k-i\varepsilon'}\right]dk \qquad (XI-27)$$

On peut maintenant intégrer (XI-27) par la méthode des résidus. En plus des poles donnés par les zéros de $(k_0^2 - k^2 + i\varepsilon)$, il y a 2 poles en $k = \pm i\varepsilon'$. On trouve alors pour XI-27 le résultat suivant

$$-\frac{i\pi}{|k_0|^2}\, e^{i|k_0|R} + \frac{i\pi}{|k_0|^2} \longleftarrow \text{contribution du pole } k = i\varepsilon' \qquad \text{(XI-28)}$$

En portant (XI-28) dans (XI-25), en effectuant les dérivations par rapport à R, et en regroupant les termes obtenus avec celui provenant de (XI-24), on obtient finalement pour $\tilde{D}_{ij}^F$

$$\tilde{D}_{ij}^F(\vec{R}_A \tau_1, \vec{R}_B \tau_2) = -\frac{1}{2}\frac{i\hbar c}{\varepsilon_0 (2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_0\, e^{-ick_0(\tau_2 - \tau_1)}\, \tilde{g}_{ij}^F(k_0, R) \qquad \text{(XI-29)}$$

avec

$$\tilde{g}_{ij}^F(k_0, R) = \frac{1}{c^2 k_0^2}\left[g_{ij}^F(k_0, R) + \frac{1}{R^3}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right)\right] \qquad \text{(XI-30)}$$

$\tilde{g}_{ij}^F(k_0, R)$ est, comme $g_{ij}^F(k_0,R)$ une fonction paire de k_0.

Interprétation physique.

Au facteur $\frac{1}{c^2k_0^2}$ près, on trouve que $\tilde{g}_{ij}^F$ est égal à g_{ij}^F corrigé du terme $\frac{1}{R^3}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right)$.

A la différence des termes contenus dans g_{ij}^F (voir XI-21), le terme correctif ne contient pas de facteur de phase $e^{i|k_0|R}$ qui décrirait un déphasage dû à un temps de propagation. Ce terme représente donc un champ instantané. En le comparant avec (XI-22), on voit qu'il est l'opposé du champ électrostatique d'un dipole.

Nous avons donc mis en évidence dans le propagateur du photon associé à l'hamiltonien $-\frac{e}{m}\vec{p}\cdot\vec{A}$ le précurseur instantané qui dans la suite des calculs, doit compenser exactement la contribution de $w(A,B)$ schématisé par le diagramme 4c qu'il faut ajouter à (4-a) et (4-b)

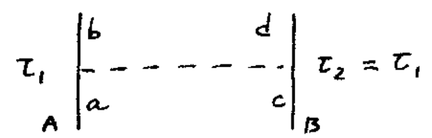


Fig 4c

C - Calcul de l'énergie d'interaction ΔE

(On utilise l'hamiltonien $-\vec{D}\cdot\vec{E}$ et les conditions aux limites de Feynman)

(1) Contribution du diagramme direct (fig 6a)

a) Contribution des diverses parties du diagramme.

- Lignes entrantes et sortantes (cf XI-1 et XI-2)

$$e^{-iE_f\tau_1/\hbar}\; e^{-iE_f\tau_2/\hbar}\; e^{+iE_f\tau_3/\hbar}\; e^{+iE_f\tau_4/\hbar} \qquad \text{(XI-31)}$$

- Vertex $$e^4\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^4 \langle f_B|r_{Bm}|e'_Bm'_B\rangle\langle e'_Bm'_B|r_{Bj}|f_B\rangle\langle f_A|r_{Al}|e_Am_A\rangle\langle e_Am_A|r_{Ai}|f_A\rangle \qquad \text{(XI-32)}$$

- Lignes internes atomiques (cf XI-4)

$$\left(-\frac{1}{2\pi i}\lim_{\eta\to 0_+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-iE(\tau_4-\tau_1)/\hbar}}{E + i\eta - E_e}dE\right)\times\left(-\frac{1}{2\pi i}\lim_{\eta\to 0_+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-iE'(\tau_3-\tau_2)/\hbar}}{E + i\eta - E_{e'}}dE'\right) \qquad \text{(XI-33)}$$

- Lignes internes de photons (cf XI-20)

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{c}{\varepsilon_0}\frac{i\hbar}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dk_0\, e^{-ick_0(\tau_2-\tau_1)}\, g^F_{ij}(k_0,R)\right] \times \left[-\frac{1}{2}\frac{c}{\varepsilon_0}\frac{i\hbar}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dk'_0\, e^{-ick'_0(\tau_3-\tau_4)}\, g^F_{\ell m}(k'_0,R)\right] \quad (XI\text{-}34)$$

b) Calcul des diverses intégrales et sommations.

On multiplie les 4 expressions précédentes (XI-31) → (XI-34) et on procède aux intégrales et sommations suivantes.

- Intégrales sur les 4 temps $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4$.

les 4 temps $\tau_1\, \tau_2\, \tau_3\, \tau_4$ varient de manière indépendante grâce aux conditions aux limites choisies pour les propagateurs.

Comme $V=0$ pour $t<t'$ et $t>t''$, on peut étendre les limites d'intégration à $+\infty$ et $-\infty$. On tombe sur des intégrales d'exponentielles multipliées par les fonctions de branchement et de débranchement de la fig 2 page X-7, ce qui donne des fonctions $\delta^{(T)}$ du type de celles de la figure 3 page VIII-2.

$$(2\pi)^4\; \underbrace{\delta^{(T)}\!\left(\frac{E}{\hbar}+ck_0-\frac{E_f}{\hbar}\right)}_{\text{Intégrale sur } \tau_1}\; \underbrace{\delta^{(T)}\!\left(\frac{E'}{\hbar}-ck_0-\frac{E_f}{\hbar}\right)}_{\text{Intégrale sur } \tau_2}\; \underbrace{\delta^{(T)}\!\left(\frac{E'}{\hbar}+ck'_0-\frac{E_f}{\hbar}\right)}_{\text{Intégrale sur } \tau_3}\; \underbrace{\delta^{(T)}\!\left(\frac{E}{\hbar}-ck'_0-\frac{E_f}{\hbar}\right)}_{\text{Intégrale sur } \tau_4} \quad (XI\text{-}35)$$

On trouve, au facteur $(2\pi)^4$ près, le produit de 4 fonctions δ impliquant la conservation des pulsations aux 4 noeuds du réseau de la figure 8a

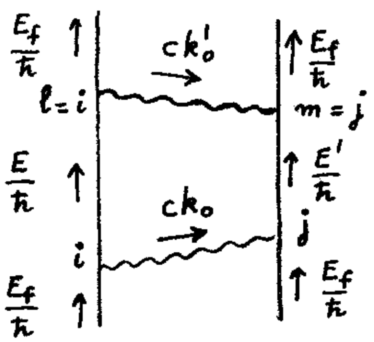


Fig 8a

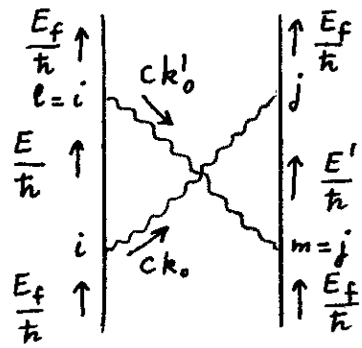


Fig 8b

- Intégrales sur E et sur E'

Multiplions (XI-35) par (XI-33) (où les exponentielles ont disparu après l'intégrale sur $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4$). L'intégrale sur E et E' est immédiate et donne :

$$(2\pi)^4 \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \frac{\hbar}{E_f-\hbar ck_0+i\eta-E_e}\; \delta^{(T)}(ck_0+ck'_0)\; \frac{\hbar}{E_f+\hbar ck_0+i\eta-E_{e'}}\; \delta^{(T)}(ck_0+ck'_0) \quad (XI\text{-}36)$$

Par ailleurs, d'après la formule (VIII-25) qui donne le carré d'une fonction $\delta^{(T)}$, on a :

$$\left[\delta^{(T)}(ck_0+ck'_0)\right]^2 = \frac{1}{c^2}\left[\delta^{(T)}(k_0+k'_0)\right]^2 = \frac{T}{2\pi c}\;\delta^{(T)}(k_0+k'_0) \quad (XI\text{-}37)$$

On retrouve bien que l'amplitude est proportionnelle à T (cf X-17 et X-22). Le fait que k_0 doit être égal à $-k'_0$ est évident sur la figure 8a (conservation des pulsations)

- Intégrale sur k'_0.

grâce à (XI-37), cette intégrale revient à remplacer $g^F_{\ell m}(k'_0,R)$ par $g^F_{\ell m}(-k_0,R) = g^F_{\ell m}(k_0,R)$ ($g^F_{\ell m}$ est en effet une fonction paire de k_0)

Avant d'effectuer l'intégrale sur k_0 effectuons la sommation suivante.

- Sommation sur les nombres quantiques magnétiques m_A m'_B.

Comme en (X-8) la sommation sur m_A et m'_B de (XI-32) donne :

$$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^4 \delta_{i\ell}\,\delta_{jm}\, |\langle e'_B \| r_B \| f_B\rangle|^2\, |\langle e_A \| r_A \| f_A\rangle|^2 \quad (XI\text{-}38)$$

La sommation sur l et m peut donc être supprimée à condition de remplacer l par i et m par j. Avant d'effectuer les sommations et intégrales qui restent, sommations sur i, j, e_A, e'_B et intégrale sur k_0, considérons la contribution du diagramme croisé de la figure 6 b.

② Contribution du diagramme croisé (figure 6 b).

Les calculs sont très voisins des précédents. La seule différence provient de l'intégrale sur les 4 temps $\tau_1\ \tau_2\ \tau_3\ \tau_4$ qui conduit à un produit de 4 fonctions $\delta^{(T)}$ impliquant la conservation des pulsations aux 4 noeuds du réseau de la figure 8 b. On voit alors immédiatement que, comme pour 8a, k'_0 doit être égal à $-k_0$; par contre, au lieu d'avoir $E'/\hbar = E_f/\hbar + ck_0$ on a maintenant $\frac{E'}{\hbar} = \frac{E_f}{\hbar} - ck_0$.

Le seul changement qui apparait concerne finalement le second dénominateur de XI-36 qui, au lieu d'être égal à $E_f + \hbar ck_0 + i\eta - E_{e'}$ vaut maintenant $E_f - \hbar ck_0 + i\eta - E_{e'}$.

En ce qui concerne les 4 indices cartésiens $i\ j\ l\ m$ relatifs aux 2 propagateurs photoniques, la sommation sur les nombres quantiques magnétiques m_A, m'_B montre, comme plus haut, qu'ils sont tous égaux 2 à 2 à i sur la ligne de A, à j sur la ligne de B aussi bien sur le diagramme 8a que 8b.

Finalement, pour tenir compte du diagramme croisé, il suffit d'ajouter à (XI-36) une expression analogue où, dans le second dénominateur k_0 est remplacé par $-k_0$. On obtient ainsi (pour les dénominateurs) :

$$\frac{1}{E_f - \hbar ck_0 + i\eta - E_e}\left[\frac{1}{E_f + \hbar ck_0 + i\eta - E_{e'}} + \frac{1}{E_f - \hbar ck_0 + i\eta - E_{e'}}\right] = \frac{2\,(E_f - E_{e'} + i\eta)}{(E_f - \hbar ck_0 + i\eta - E_e)\left[(E_{e'} - E_f - i\eta)^2 - \hbar^2c^2k_0^2\right]} \qquad \text{(XI-39)}$$

③ Regroupement de tous les résultats précédents.

- En regroupant tous les résultats précédents, on obtient pour la somme des contributions à $\langle\varphi_0|\tilde{U}(t'',t')|\varphi_0\rangle$ des diagramme direct et croisé

$$\langle\varphi_0|\tilde{U}^{(4)}(t'',t')|\varphi_0\rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{cT}{2\pi}\sum_{e_A e'_B} |\langle e'_B\|r_B\|f_B\rangle|^2\ |\langle e_A\|r_A\|f_A\rangle|^2 \ \times$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk_0\ \frac{2\,(E_f - E_{e'} + i\eta)}{(E_f - \hbar ck_0 + i\eta - E_e)\left[(E_{e'} - E_f - i\eta)^2 - \hbar^2c^2k_0^2\right]} \times \sum_{ij}\left[g^F_{ij}(k_0,R)\right]^2 \qquad \text{(XI-40)}$$

- Comme $g^F_{ij}(k_0,R)$ est une fonction paire de k_0 (voir XI-21), on peut remplacer l'intégrale sur k_0 de $-\infty$ à $+\infty$ par une intégrale de 0 à $+\infty$ à condition de remplacer le coefficient multiplicatif de $g^{F\,2}_{ij}$ par 2 fois sa partie paire, c-à-d par

$$\frac{4\,(E_{e'} - E_f - i\eta)(E_e - E_f - i\eta)}{\left[(E_e - E_f - i\eta)^2 - \hbar^2c^2k_0^2\right]\left[(E_{e'} - E_f - i\eta)^2 - \hbar^2c^2k_0^2\right]} \qquad \text{(XI-41)}$$

- Calcul de $\sum_{ij}\left[g^F_{ij}(k_0,R)\right]^2$.

Reportons nous à (XI-21) et utilisons les identités suivantes, dont la 1ère a été déjà démontrée en X-10

$$\sum_{i,j}\left(\delta_{ij} - \frac{3R_iR_j}{R^2}\right)^2 = 6 \qquad \text{(XI-42-a)}$$

$$\sum_{i,j}\left(\delta_{ij}-\frac{R_iR_j}{R^2}\right)^2 = \sum_{ij}\left[\delta_{ij}^2 - 2\delta_{ij}\frac{R_iR_j}{R^2}+\frac{R_i^2R_j^2}{R^4}\right] = 3-2+1 = 2 \qquad (XI-42-b)$$

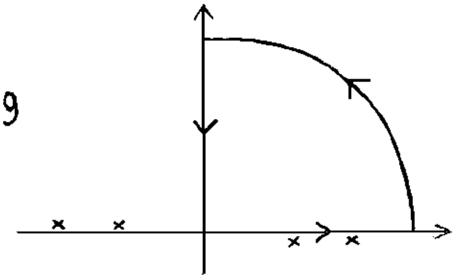
$$\sum_{i,j}\left(\delta_{ij}-\frac{R_iR_j}{R^2}\right)\left(\delta_{ij}-\frac{3R_iR_j}{R^2}\right) = \sum_{ij}\left[\delta_{ij}^2 - 4\delta_{ij}\frac{R_iR_j}{R^2}+\frac{3R_i^2R_j^2}{R^4}\right] = 3-4+3 = 2 \qquad (XI-42-c)$$

On obtient, en remplaçant $|k_0|$ par k_0 puisque k_0 varie de 0 à $+\infty$:

$$\sum_{i,j}\left[g^F_{i,j}(k_0,R)\right]^2 = 2e^{ik_0R}\,\frac{k_0^4}{R^2}\left[1+\frac{2i}{k_0R}-\frac{5}{k_0^2R^2}-\frac{6i}{k_0^3R^3}+\frac{3}{k_0^4R^4}\right] \qquad (XI-43)$$

– On voit sur XI-43 et XI-41 que la fonction à intégrer sur k_0 de 0 à $+\infty$ possède des pôles en $\hbar ck_0 = \pm[E_e-E_f-i\eta]$ et $\hbar ck_0 = \pm[E_{e'}-E_f-i\eta]$.

Fig 9



c-à-d en dessous de l'axe réel >0 et au dessus de l'axe réel <0 (voir figure 9)

Considérons alors le contour représenté sur la figure 9. Il n'enferme aucun pôle. Comme la contribution le long du $1/4$ de cercle est nulle (à cause de la décroissance très rapide de e^{ik_0R}), on voit que l'intégrale le long de l'axe réel >0 est égale à l'intégrale le long de l'axe imaginaire >0

On peut donc dans l'intégrale sur k_0 de 0 à $+\infty$ faire le changement de variables :
$$k_0 = iu \qquad (XI-44)$$
et intégrer sur u de 0 à $+\infty$.

On obtient ainsi, en mettant en facteur $-iT/\hbar$ (voir X-22)

$$\langle\varphi_0|\tilde{U}(t'',t')|\varphi_0\rangle = 1 - i\frac{T}{\hbar}\,\Delta E \qquad (XI-45)$$

avec l'expression finale suivante pour ΔE :

$$\boxed{\Delta E = -\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{4\hbar c}{\pi}\sum_{e\,e'} |\langle e'_B\|r_B\|f_B\rangle|^2\,|\langle e_A\|r_A\|f_A\rangle|^2 \times \int_0^\infty du\,\frac{(E_e-E_f)(E_{e'}-E_f)}{\left[(E_e-E_f)^2+\hbar^2c^2u^2\right]\left[(E_{e'}-E_f)^2+\hbar^2c^2u^2\right]}\,\frac{u^4e^{-2uR}}{R^2}\left(1+\frac{2}{uR}+\frac{5}{u^2R^2}+\frac{6}{u^3R^3}+\frac{3}{u^4R^4}\right)} \qquad (XI-46)$$

formule établie la 1ère fois par Casimir et Polder

Bibliographie

(1). H.B.G. CASIMIR, D. POLDER Phys. Rev. 73, 360 (1948)
(2). H.B.G. CASIMIR Journal de chimie Physique 46, 407 (1959)
(3). E.A. POWER, S. ZIENAU, Nuovo Cimento 6, 7 (1957)
(4). R.R. Mc LONE, E.A. POWER Proc. Roy. Soc. 286 A, 573 (1965)
(5). E.A. POWER Introductory Quantum Electrodynamics 1964 London (Longmans)
(6). I.E. DZIALOSHINSKII J.E.T.P. 3, 977 (1956)
(7). L. LANDAU et E. LIFCHITZ Electrodynamique des milieux continus. Chapitre XIII § 90
(8) G. FEINBERG, J. SUCHER Phys. Rev. A 2, 2395 (1970)
(9) D. LANGBEIN. Theory of Van der Waals attraction Springer tracts in Modern Physics Vol 72 1974