

28-10-80

Corrections radiatives stimulées et spontanées IV-1

pour une particule chargée sans spin (1^{ère} partie)

Buts de ce cours

- Aborder le problème des corrections radiatives sur le cas, simple mathématiquement, d'une particule sans spin.
- Introduire la méthode de calcul et les idées physiques essentielles et préparer ainsi la discussion ultérieure des effets liés au spin.
- Retrouver par cette méthode tous les résultats établis l'an dernier à partir des équations de Heisenberg.

Plan de ce cours

- ① Hypothèses, notations (T1 à T5).
- ② Hamiltonien effectif de la particule (T6 à T9).
- ③ Effets stimulés et effets spontanés (T10 à T15).
- ④ Forme opératorielle de l'hamiltonien effectif (T16 à T18).
- ⑤ Calcul explicite des effets stimulés (T19 à T22).

Hypothèses sur la particule T1

- Charge e , masse m .
- On ignore le spin.
- Particule liée à un centre O par un potentiel électrostatique $e\phi_0(\vec{r})$
- Particule interagissant avec un champ magnétique statique décrit par un potentiel vecteur $\vec{A}_0(\vec{r})$
 $\vec{B}_0(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_0(\vec{r})$
- Hamiltonien atomique

$$H_A = \frac{\vec{\pi}_0^2}{2m} + e\phi_0(\vec{r})$$

$$\vec{\pi}_0 = \vec{p} - e\vec{A}_0(\vec{r})$$

$$H_A |i\rangle = E_i |i\rangle$$
- Ordre de grandeur de E_i : E_L (énergie de liaison)
- On ignore toutes les corrections relativistes (spin-orbite, Darwin...)

Quelques commutateurs utiles T2

$$[\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, \phi(\vec{r})] = [\vec{E} \cdot \vec{p}, \phi(\vec{r})] = \frac{\hbar}{i} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \phi(\vec{r})$$

$$[\pi_{0i}, \pi_{0j}] = [p_i - eA_{0i}(\vec{r}), p_j - eA_{0j}(\vec{r})]$$

$$= i e \hbar \underbrace{(\partial_i A_{0j} - \partial_j A_{0i})}_{\sum_k \epsilon_{ijk} (\vec{\nabla} \times \vec{A}_0)_k}$$

$$[\pi_{0i}, \pi_{0j}] = i e \hbar \sum_k \epsilon_{ijk} B_{0k}$$

$$[\vec{a} \cdot \vec{\pi}_0, \vec{b} \cdot \vec{\pi}_0] = i e \hbar (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{B}_0$$

$(\vec{a}, \vec{b}$: vecteurs classiques)

$$[\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, \pi_0^2] =$$

$$i e \hbar \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} E_i \epsilon_{ijk} (B_{0k} \pi_{0j} + \pi_{0j} B_{0k})$$

Champ de rayonnement

T-3

T-4

Interaction particule - rayonnement

IV-2

Développement du champ en modes

(dans un cube de côté L)

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\epsilon_0 L^3}} i (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})$$

\vec{E} : polarisation \perp à \vec{k} : vecteur d'onde
 $\omega = ck$ pulsation

$a_{\vec{k}\vec{E}}^+$ op. de création d'un photon \vec{k}, \vec{E}
 $a_{\vec{k}\vec{E}}$ " " destruction " " "

Hamiltonien du rayonnement

$$H_R = \sum_{\vec{k}\vec{E}} H_{\omega} \quad H_{\omega} = \hbar \omega (a_{\vec{k}\vec{E}}^+ a_{\vec{k}\vec{E}} + \frac{1}{2})$$

$$H_{\omega} |N\rangle = (N + \frac{1}{2}) \hbar \omega |N\rangle$$

$|N\rangle$: état où le mode \vec{k}, \vec{E} contient N photons

$|0\rangle$: vide de photons

Hamiltonien du système global

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{\Pi}_0 - e\vec{A}(\vec{r})]^2 + e\phi_0(\vec{r}) + H_R$$

$$H = \underbrace{\frac{\vec{\Pi}_0^2}{2m}}_{H_A} + e\phi_0(\vec{r}) + H_R + V$$

$$V = -\frac{e}{m} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\Pi}_0 + \frac{e^2}{2m} (\vec{A}(\vec{r}))^2$$

L'hamiltonien d'interaction V agit à la fois sur les variables de la particule (\vec{r} et \vec{p} apparaissent dans V) et sur les variables du rayonnement ($a_{\vec{k}\vec{E}}$ et $a_{\vec{k}\vec{E}}^+$ apparaissent dans le développement de \vec{A})

Approximation dipolaire électrique

$\vec{A}(\vec{r})$ remplacé par $\vec{A}(\vec{0})$

$$\vec{A}(\vec{0}) = \sum_{\vec{k}\vec{E}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}} (a_{\vec{k}\vec{E}} \vec{E} + a_{\vec{k}\vec{E}}^+ \vec{E}^*)$$

Cohérence avec les approximations précédentes

Interaction particule - mode ω

T-5

Structure de V

(Pour simplifier, on écrit

$$a_{\vec{k}\vec{E}} = a, \quad a_{\vec{k}\vec{E}}^+ = a^+, \quad \mathcal{N} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}}$$

$$V = V^+ a^+ + V^- a$$

$$+ V^{++} (a^+)^2 + V^{--} (a^-)^2 + V^{+-} a^+ a + V^{-+} a a^+$$

1^{ère} ligne: termes à 1 photon

2^{ème} ligne: termes à 2 photons

V^+, V^-, V^{++}, \dots sont des opérateurs relatifs à la particule

$$V^- = -\mathcal{N} \frac{e}{m} \vec{E} \cdot \vec{\Pi}_0 = (V^+)^+$$

$$V^{++} = \frac{e^2 \mathcal{N}^2}{2m} \vec{E}^* \cdot \vec{E}^+ = (V^{--})^+$$

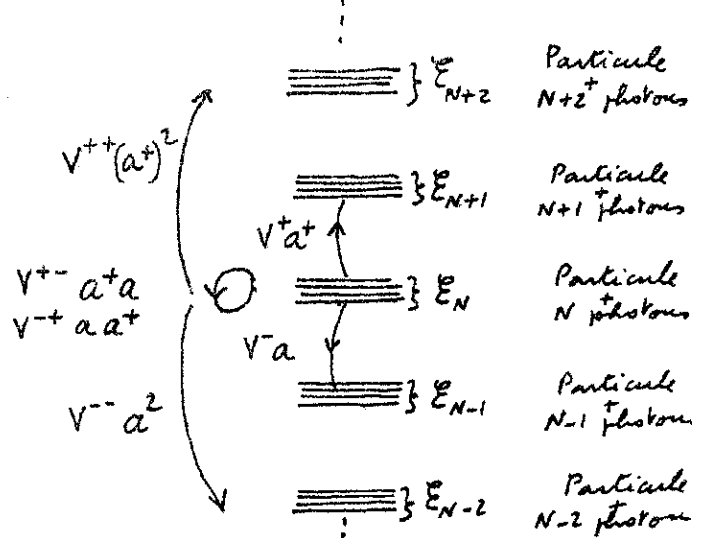
$$V^{+-} = \frac{e^2 \mathcal{N}^2}{2m} \underbrace{\vec{E}^* \cdot \vec{E}}_{=1} = V^{-+} = \frac{e^2}{2m} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega L^3}$$

Multiplicités non perturbées

T-6

du système particule - mode ω

Bien séparées (on suppose $\hbar \omega \gg E_L$)



Couplages induits par V

- Nouvelles fréquences de Bohr de la particule (vibration à $\omega, 2\omega, 3\omega, \dots$)
- Modification des énergies dans chaque multiplicité.

Remarque

Même si $\hbar\omega \gg E_L$, il existe toujours un recouvrement des multiplicités

En effet, le spectre de H_A est illimité vers le haut

Exemple

- Dégenérescence possible entre état où la particule est dans le continuum en présence de N photons
- état où la particule est dans l'état fondamental en présence de $N+1$ photons

Transitions réelles possibles entre ces 2 états, décrivant une ionisation de l'atome par le rayonnement incident

Néanmoins, si $\hbar\omega \gg E_L$, section efficace d'ionisation négligeable
Autres processus réels possibles : diffusion Thomson, Compton...

[T-7] [T-8]

Hamiltonien effectif H_{eff}

[IV-3]

Si l'on ne s'intéresse qu'aux modifications du mouvement lent de la particule (modification des propriétés dynamiques), il suffit d'étudier l'effet de V sur E_N

Effet des absorptions et émissions virtuelles de photons par la particule décrit par un hamiltonien effectif n'agissant qu'à l'intérieur de E_N

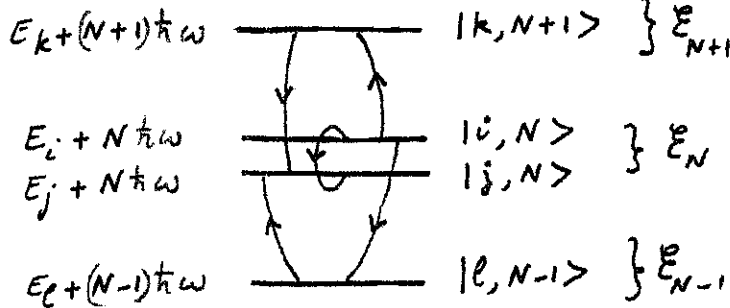
Calcul fait à l'ordre 2 inclus en ϵ

$V^{++}(a^+)^2$ et $V^{--}(a)^2$ sont non diagonaux et déjà d'ordre 2 en ϵ . Ils n'interviendront donc pas

Seuls interviendront $V^{+-}a^+a$ et $V^{-+}aa^+$ à l'ordre 1
 V^+a^+ et V^-a à l'ordre 2

Elements de matrice de H_{eff}

[T-9]



$$\langle j, N | H_{eff} | i, N \rangle = \langle j, N | (V^{+-}a^+a + V^{-+}aa^+) | i, N \rangle + \frac{1}{2} \sum_k \langle j, N | V^- a | k, N+1 \rangle \langle k, N+1 | V^+ a^+ | i, N \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_k - \hbar\omega} \right] + \frac{1}{2} \sum_l \langle j, N | V^+ a^+ | l, N-1 \rangle \langle l, N-1 | V^- a | i, N \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_l + \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_l + \hbar\omega} \right]$$

Dépendance en N de H_{eff}

[T-10]

En utilisant $a|N\rangle = \sqrt{N} |N-1\rangle$
 $a^+|N\rangle = \sqrt{N+1} |N+1\rangle$, on obtient

$$\langle j, N | H_{eff} | i, N \rangle = (N+1) \langle j | R | i \rangle + N \langle j | S | i \rangle$$

où R et S n'agissent que sur la particule et sont donnés par

$$\langle j | R | i \rangle = \langle j | V^{-+} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_k \langle j | V^- | k \rangle \langle k | V^+ | i \rangle \times \left[\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_k - \hbar\omega} \right]$$

$$\langle j | S | i \rangle = \langle j | V^{+-} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_l \langle j | V^+ | l \rangle \langle l | V^- | i \rangle \times \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_i - E_l + \hbar\omega} + \frac{1}{E_j - E_l + \hbar\omega} \right]$$

$$\text{Finalement}$$

$$H_{eff} = (N+1)R + NS = N(R+S) + R$$

Effets stimulés

Décrits par les termes de Heff proportionnels à N : $N(R+S)$

Effets produits par l'interaction avec un rayonnement incident, contenu dans le mode ω .

Proportionnels à l'intensité de ce rayonnement.

Effets spontanés

Décrits par les termes de Heff indépendants de N : R

Ces effets sont produits par l'interaction avec le vide de rayonnement.

Dans le vide, la particule interagit avec tous les modes. Au deuxième ordre en e , les effets des divers modes s'ajoutent indépendamment.

Justification du calcul mode par mode.

T-11 T-12

Moyenne du carré du champ

IV-4

Un calcul simple donne

$$\langle N | E^2 | N \rangle = \frac{\hbar \omega}{\epsilon_0 L^3} \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Terme en N : contribution du rayonnement incident $\langle E_{inc}^2 \rangle$

Terme en $\frac{1}{2}$: contribution de fluctuations du vide $\langle E_{vide}^2 \rangle$

Introduction de 2 énergies caractéristiques importantes

$$E_v^N = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m\omega^2} = \frac{e^2 \hbar}{2m\epsilon_0 \omega L^3} N$$

$$E_v^0 = \frac{e^2 \langle E_{vide}^2 \rangle}{2m\omega^2} = \frac{e^2 \hbar}{2m\epsilon_0 \omega L^3} \frac{1}{2}$$

$$E_v^N = 2N E_v^0$$

Interprétation physique de E_v^N et E_v^0

T-13

On verra plus loin que, dans une onde monochromatique classique (fréquence ω , champ efficace E), l'énergie cinétique de vibration d'une particule classique (e, m) vaut

$$E_v^{class} = \frac{e^2 E^2}{2m\omega^2}$$

E_v^N est donc l'énergie cinétique de vibration de la particule due au rayonnement incident

E_v^0 est donc l'énergie cinétique de vibration de la particule due aux fluctuations du vide

Le calcul de Heff au 2^{ème} ordre inclus en e est un calcul au 1^{er} ordre en E_v^N et E_v^0

Etude comparée des effets stimulés et spontanés

T-14

$$Heff = N(R+S) + R$$

On peut réécrire le dernier terme R

$$R = \frac{1}{2}(R+S) + \frac{1}{2}(R-S)$$

Terme $\frac{1}{2}(R+S)$

Même structure que $N(R+S)$, au remplacement près de $\langle E_{inc}^2 \rangle$ par $\langle E_{vide}^2 \rangle$

Même interprétation physique : ce terme représente les effets "stimulés" par les fluctuations du vide

Terme $\frac{1}{2}(R-S)$

Terme nouveau par rapport aux effets stimulés.

A cause de ce terme, les corrections radiatives spontanées ne peuvent être entièrement décrites par une approche type Welton.

Justification de l'approche précédente T-15

qui utilise une description quantique du rayonnement même pour les effets stimulés (pour lesquels une description semi-classique suffirait)

- Le même calcul donne à la fois effets stimulés et spontanés
- La comparaison des termes spontanés avec les termes stimulés permet d'identifier les effets spontanés susceptible d'une interprétation à la Welton et de voir s'il y en a d'autres.
- Autre manière d'obtenir une séparation claire et non ambiguë entre effets des fluctuations du vide et le reste (réaction de rayonnement).
Confirmation par une autre méthode des conclusions du cours 1979-80

T-16) Forme opératoirelle de Heff IV-5

Au lieu d'être définis par leurs éléments de matrice (voir T-10), R et S peuvent être mis sous forme opératoirelle.

Développement en puissances de $E_L/\hbar\omega$ de $\frac{1}{E_i - E_k \pm \hbar\omega}$

$$\frac{1}{E_i - E_k - \hbar\omega} = -\frac{1}{\hbar\omega} - \frac{E_i - E_k}{\hbar^2\omega^2} - \frac{(E_i - E_k)^2}{\hbar^3\omega^3} + \dots$$

On "remonte" ainsi les énergies électroniques au numérateur

Puis on utilise

$$E_i |i\rangle = H_A |i\rangle \quad E_k |k\rangle = H_A |k\rangle$$

On fait alors apparaître une relation de fermeture sur les états intermédiaires et, par suite, l'élément de matrice entre $|i\rangle$ et $|j\rangle$ d'un produit d'opérateurs.

Exemple de calcul

T-17

$$\frac{1}{2} \sum_k \frac{\langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle}{E_i - E_k - \hbar\omega}$$

Terme en $\frac{1}{\hbar\omega}$

$$-\frac{1}{2\hbar\omega} \sum_k \langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle = -\frac{1}{2\hbar\omega} \langle j|V^-V^+|i\rangle$$

Terme en $\frac{1}{\hbar^2\omega^2}$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \sum_k \langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle (E_i - E_k) \\ & = -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \sum_k \left(\langle j|V^-|k\rangle \langle k|V^+H_A|i\rangle - \langle j|V^-H_A|k\rangle \langle k|V^+|i\rangle \right) \\ & = -\frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \langle j|V^-V^+H_A - V^-H_AV^+|i\rangle \\ & = \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \langle j|V^-[H_A, V^+]|i\rangle \end{aligned}$$

Et ainsi de suite ...

Résultat du calcul pour R et S T-18

$$H_{\text{eff}} = (N+1)R + NS$$

$$\begin{aligned} R &= V^- + \\ & - \frac{1}{\hbar\omega} V^-V^+ \\ & + \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} (V^-[H_A, V^+] - [H_A, V^-]V^+) \\ & + \frac{1}{2\hbar^3\omega^3} (V^-[[H_A, V^+], H_A] - [H_A, [H_A, V^-]]V^+) \\ & + \dots \end{aligned}$$

S s'obtient à partir de R

- en interchangeant V^+ et V^-
- en remplaçant ω par $-\omega$

R et S sont des opérateurs électroniques.

Calcul de N(R+S)

T-19 T-20

Termes en $\frac{E_V^N}{\hbar\omega} \frac{E_L}{\hbar\omega}$

IV-6

On remplace dans R et S, V^{+-} , V^{-+} , V^+ , V^- par leurs expressions (voir T-5). On fait apparaître E_V^N (voir T-12). On obtient ainsi

$$H_{\text{eff}}(\text{stimulés}) = N(R+S) = E_V^N + E_V^N \frac{1}{\hbar\omega} \frac{1}{m} [\vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] + E_V^N \frac{1}{2\hbar^2\omega^2} \frac{1}{m} ([\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, [H_A, \vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0]] + \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E}^*) + \dots$$

Ordres de grandeur

- 1^{ère} ligne : E_V^N
- 2^{ème} ligne : $E_V^N \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\pi_0^2}{m} \approx E_V^N \frac{E_L}{\hbar\omega}$
- 3^{ème} ligne : $E_V^N \frac{1}{\hbar^2\omega^2} \frac{\pi_0^2}{2m} H_A \approx E_V^N \frac{E_L^2}{\hbar^2\omega^2}$

On arrête le calcul à cet ordre

On utilise (voir T2)

$$[\vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0, \vec{E} \cdot \vec{\pi}_0] = i e \hbar (\vec{E}^* \times \vec{E}) \cdot \vec{B}_0$$

$\vec{E}^* \cdot \vec{E} = 0$ si \vec{E} est réel, c-à-d si l'onde incidente a une polarisation linéaire. Par contre, si \vec{E} est complexe (polarisation circulaire ou elliptique), $\vec{E}^* \times \vec{E} \neq 0$ et a la direction du vecteur d'onde \vec{k}

Le terme en $E_V^N \frac{E_L}{\hbar\omega}$ peut donc se mettre sous la forme

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

avec

$$\vec{\mu} = i \frac{e^3 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^3} \vec{E} \times \vec{E}^*$$

$\vec{\mu}$ apparaît comme un moment magnétique effectif créé par le rayonnement incident

Termes en $\frac{E_V^N}{\hbar^2\omega^2} \frac{E_L^2}{\hbar^2\omega^2}$

T-21

On obtient aisément (voir T-2)

$$\frac{E_V^N}{2m\hbar^2\omega^2} \left([\vec{E} \cdot \vec{\pi}_0, [\frac{\pi_0^2}{2m} + e\phi_0(\vec{r}), \vec{E}^* \cdot \vec{\pi}_0]] + \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E}^* \right) = e \delta\phi_0(\vec{r}) - \frac{e}{2m} (\vec{\delta A}_0(\vec{r}) \cdot \vec{\pi}_0 + \vec{\pi}_0 \cdot \vec{\delta A}_0(\vec{r})) + W_d$$

avec

$$\delta\phi_0(\vec{r}) = \frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})(\vec{E}^* \cdot \vec{\nabla}) \phi_0(\vec{r})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\delta A}_0(\vec{r}) = \vec{\delta B}_0(\vec{r}) =$$

$$\frac{e^2 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^2\omega^4} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla})(\vec{E}^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}_0(\vec{r})$$

$$W_d = \frac{e^4 \langle E_{inc}^2 \rangle}{2m^3\omega^4} [\vec{B}_0^2 - (\vec{E} \cdot \vec{B}_0)(\vec{E}^* \cdot \vec{B}_0)]$$

Récapitulation du calcul

T-22

sur les effets stimulés

E_V^N : Déplacement en bloc des niveaux. Equivalent à une augmentation de la masse au repos $\delta m = \frac{E_V^N}{c^2}$

$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$: Apparition d'un moment magnétique effectif se couplant à \vec{B}_0

$\left\{ \begin{array}{l} \phi_0 \rightarrow \phi_0 + \delta\phi_0 \\ \vec{B}_0 \rightarrow \vec{B}_0 + \delta\vec{B}_0 \end{array} \right.$ Modification des champs statiques électrique et magnétique "vus" par la particule

(Facteurs de forme électrique et magnétique)

W_d Correction quadratique en de type diamagnétique.