Transformation de Göppert-Mayer pour des particules dans un champ extérieur

1 - Particules dans un champ extérieur

- Lagrangien. Phénomènes négligés
- Moments conjugués - Hamiltonien
- Description quantique
- Cas d'un système globalement neutre
  Approximation des grandes longueurs d'onde

2 - Transformation de Goppert-Mayer

- Changement de lagrangien. Nouveau lagrangien
- Equivalence avec un changement de jauge
- Nouveaux moments conjugués - Nouvel hamiltonien
- Transformation unitaire associé
- Avantages du nouveau point de vue

3 - Généralisations

- Champ considéré non plus comme un champ extérieur mais comme un système dynamique (cours IX et X)
- Cas d'un système non globalement neutre : ion couplé à un champ extérieur

---

Lagrangien décrivant la dynamique des particules dans $\vec{A}_e(\vec{r},t)$, $U_e(\vec{r},t)$

$$L = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \sum_\alpha q_\alpha \left[\dot{\vec{r}}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t) - U_e(\vec{r}_\alpha,t)\right]$$

Phénomènes négligés : interactions magnétiques, effets de retard, champ transverse rayonné par les particules...

Moments conjugués

$$\vec{p}_{\alpha L} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_\alpha} = m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha + q_\alpha \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t)$$

Hamiltonien

$$H_L = \sum_\alpha \vec{p}_{\alpha L} \cdot \dot{\vec{r}}_\alpha - L = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{p}_{\alpha L} - q_\alpha \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t)\right]^2 + V_{coul} + \sum_\alpha q_\alpha U_e(\vec{r}_\alpha,t)$$

Description quantique construite sur L

$\vec{r}_\alpha^{(1)} = \vec{r}_\alpha$ multiplication par $\vec{r}_\alpha$ $\qquad \vec{P}_{\alpha L}^{(1)} = \vec{P}_\alpha = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_\alpha$

$$H_L^{(1)} = H_{PL}^{(1)} + h_{IL}^{(1)}$$

$$\begin{cases} H_{PL}^{(1)} = \sum_\alpha \frac{\vec{P}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V_{coul}(\cdots \vec{r}_\alpha \cdots) \\ h_{IL}^{(1)} = \sum_\alpha \left[-\frac{q_\alpha}{m_\alpha}\vec{P}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t) + \frac{q_\alpha^2}{2m_\alpha}\vec{A}_e^2(\vec{r}_\alpha,t) + q_\alpha U_e(\vec{r}_\alpha,t)\right] \end{cases}$$

Système localisé près de l'origine O

- Globalement neutre $\sum_\alpha q_\alpha = 0$
- Localisé dans un volume d'extension linéaire $a \ll \lambda$
  Développement de $\vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t)$ et $U_e(\vec{r}_\alpha,t)$ en puissances de $\vec{r}_\alpha$
  ↳ Moments multipolaires
- Approximation dipolaire électrique. On ne garde que le moment dipolaire électrique
  $$\vec{d} = \sum_\alpha q_\alpha \vec{r}_\alpha$$
  ↳ $$\sum_\alpha q_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t) \simeq \sum_\alpha q_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t) = \dot{\vec{d}} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t)$$
  $$\sum_\alpha q_\alpha U_e(\vec{r}_\alpha,t) \simeq \left(\sum_\alpha q_\alpha\right) U_e(\vec{0},t) + \sum_\alpha q_\alpha \vec{r}_\alpha \cdot \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t) = \vec{d} \cdot \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t)$$
- Lagrangien
  $$L = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \dot{\vec{d}} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t) - \vec{d} \cdot \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t)$$
- Hamiltonien
  $$H_L = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{P}_{\alpha L} - q_\alpha \vec{A}_e(\vec{0},t)\right]^2 + V_{coul} + \vec{d} \cdot \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t)$$
- Moment conjugué $\quad \vec{P}_{\alpha L} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_\alpha} = m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha + q_\alpha \vec{A}_e(\vec{0},t)$

Changement de Lagrangien $\quad L \to L' = L + \frac{d}{dt} f(\{\vec{r}_\alpha\},t)$

$$f(\{\vec{r}_\alpha\},t) = -\sum_\alpha q_\alpha \vec{r}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t) = -\vec{d} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t)$$

Nouveau Lagrangien

$$L' = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \dot{\vec{d}} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t) - \vec{d} \cdot \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t) - \dot{\vec{d}} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t) - \vec{d} \cdot \dot{\vec{A}}_e(\vec{0},t)$$

$$= \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \vec{d} \cdot \left[-\dot{\vec{A}}_e(\vec{0},t) - \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t)\right]$$

$$= \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \vec{d} \cdot \vec{E}_e(\vec{0},t)$$

Equivalence avec un changement de jauge : $\chi(\vec{r},t) = -\vec{r} \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t)$

$$\begin{cases} \vec{A}'_e(\vec{r},t) = \vec{A}_e(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) = \vec{A}_e(\vec{r},t) - \vec{A}_e(\vec{0},t) \\ U'_e(\vec{r},t) = U_e(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\vec{r},t) = U_e(\vec{r},t) + \vec{r} \cdot \dot{\vec{A}}_e(\vec{0},t) \end{cases}$$

↳ $$\begin{cases} \vec{A}'_e(\vec{0},t) = \vec{0} \\ \vec{\nabla} U'_e(\vec{0},t) = \vec{\nabla} U_e(\vec{0},t) + \dot{\vec{A}}_e(\vec{0},t) = -\vec{E}_e(\vec{0},t) \end{cases}$$

Le lagrangien L' trouvé plus haut peut s'écrire comme l'ancien L avec $\vec{A}_e$ et U_e remplacés par $\vec{A}'_e$ et U'_e

$$L' = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha^{\,2} - V_{coul} + \sum_\alpha q_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha \cdot \underbrace{\vec{A}'_e(\vec{0},t)}_{\vec{0}} \underbrace{- \sum_\alpha q_\alpha \vec{r}_\alpha \cdot \vec{\nabla} U'_e(\vec{0},t)}_{\vec{d}\cdot\vec{E}_e(\vec{0},t)}$$

Nouveau moment conjugué - Nouvel hamiltonien

$$\vec{p}_{\alpha L'} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_\alpha} = m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha$$

$$H_{L'} = \sum_\alpha \vec{p}_{\alpha L'} \cdot \dot{\vec{r}}_\alpha - L' = \sum_\alpha \frac{\vec{p}_{\alpha L'}^{\,2}}{2m_\alpha} + V_{coul} - \vec{d}\cdot\vec{E}_e(\vec{0},t)$$

$$H^{(2)}_{L'} = H^{(2)}_{PL'} + h^{(2)}_{IL'} \qquad \begin{cases} H^{(2)}_{PL'} = \sum_\alpha \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} + V_{coul} \\ h^{(2)}_{IL'} = -\vec{d}\cdot\vec{E}_e(\vec{0},t) \end{cases}$$

Transformation unitaire faisant passer d'un point de vue à l'autre

$$T(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{d}\cdot\vec{A}_e(\vec{0},t)\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\sum_\alpha q_\alpha \vec{r}_\alpha \cdot \vec{A}_e(\vec{0},t)\right\}$$

Avantages du nouveau point de vue

- L'opérateur $\vec{p}_\alpha = (\hbar/i)\vec{\nabla}_\alpha$ décrit la grandeur physique $\vec{p}_{\alpha L'} = m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha$ c'est à dire la quantité de mouvement
- L'opérateur $H^{(2)}_{PL'}$ décrit la grandeur physique énergie cinétique + énergie potentielle des particules (énergie totale)
  ↳ Sens physique clair des états propres de $H^{(2)}_{PL'}$
- L'opérateur $h^{(2)}_{IL'}$ a une forme plus simple que $h^{(1)}_{IL}$
  Ne contient qu'un seul terme et est linéaire en q_α
  S'exprime en fonction du champ $\vec{E}_e$ et non des potentiels
- Amplitude de transition entre un état d'énergie totale E_a à t_i et un état d'énergie totale E_b à t_f : plus facile à calculer dans le point de vue (2) car $H^{(2)}_{PL'}$ représente bien dans ce point de vue l'énergie totale

$$\langle b | U^{(2)}(t_f,t_i) | a \rangle \qquad H^{(2)}_{PL'}|a\rangle = E_a|a\rangle \qquad H^{(2)}_{PL'}|b\rangle = E_b|b\rangle$$

Dans le point de vue (1), la même amplitude vaut $\langle b | T(t_f)\, U^{(1)}(t_f,t_i)\, T^+(t_i) | a\rangle$ car l'état d'énergie totale E_a à t_i est $T^+(t_i)|a\rangle$ et non $|a\rangle$, et l'état d'énergie totale E_b à t_f est $T^+(t_f)|b\rangle$ et non $|b\rangle$

Pour vérifier explicitement l'identité des amplitudes de transition dans les 2 points de vue, à chaque ordre en q_α, il faut développer en puissances de q_α, $U^{(2)}$, $U^{(1)}$ et aussi $T^+(t_i)$ et $T(t_f)$.

Charge totale, masse totale et centre de masse de l'ion

$$Q = \sum_\alpha q_\alpha \qquad M = \sum_\alpha m_\alpha \qquad \vec{R} = \frac{1}{M}\sum_\alpha m_\alpha \vec{r}_\alpha$$

Hamiltonien dans le point de vue habituel

$$H^{(1)} = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{p}_\alpha - q_\alpha \vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t)\right]^2 + V_{coul} + \sum_\alpha q_\alpha U_e(\vec{r}_\alpha,t)$$

Approximation des grandes longueurs d'onde

$$\vec{A}_e(\vec{r}_\alpha,t) \to \vec{A}_e(\vec{R},t) \qquad U_e(\vec{r}_\alpha,t) \to U_e(\vec{R},t) + (\vec{r}_\alpha-\vec{R}).\vec{\nabla} U_e(\vec{R},t)$$

$$\hookrightarrow \quad H^{(1)} = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{P}_\alpha - q_\alpha \vec{A}_e(\vec{R},t)\right]^2 + V_{Coul} + Q\, U_e(\vec{R},t) + \sum_\alpha q_\alpha(\vec{r}_\alpha-\vec{R}).\vec{\nabla} U_e(\vec{R},t)$$

Transformation unitaire

$$T(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\sum_\alpha q_\alpha(\vec{r}_\alpha-\vec{R}).\vec{A}_e(\vec{R},t)\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{d}.\vec{A}_e(\vec{R},t)\right\}$$

$\vec{d} = \sum_\alpha q_\alpha(\vec{r}_\alpha - \vec{R})$: Moment dipolaire par rapport au centre de masse

Nouvel hamiltonien

$$H^{(2)} = T(t)\, H^{(1)}\, T^+(t) + i\hbar \frac{dT(t)}{dt} T^+(t)$$

Transformé de $\vec{P}_\alpha$

$$T(t)\vec{P}_\alpha T^+(t) = \vec{P}_\alpha + T(t)\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}_\alpha} T^+(t)$$

$$= \vec{P}_\alpha + q_\alpha \vec{A}_e(\vec{R},t) - \left(\sum_{\alpha'} q_{\alpha'}\right)\frac{m_\alpha}{M}\vec{A}_e(\vec{R},t) + \text{Termes en } \vec{\nabla}_{\vec{r}_\alpha}\vec{A}_e(\vec{R},t)$$

Termes nouveaux provenant de la dépendance de $\vec{R}$ en $\vec{r}_\alpha$

Négligeables (ordre supérieur en a_0/λ)

$$\hookrightarrow \quad T(t)\vec{P}_\alpha T^+(t) = \vec{P}_\alpha + q_\alpha\vec{A}_e(\vec{R},t) - \frac{Q}{M} m_\alpha \vec{A}_e(\vec{R},t)$$

Calcul de $T(t)H(t)T^+(t)$

$$T(t)H(t)T^+(t) = \sum_\alpha \frac{1}{2m_\alpha}\left[\vec{P}_\alpha - \frac{Q}{M}m_\alpha\vec{A}_e(\vec{R},t)\right]^2 + V_{Coul} + Q\,U_e(\vec{R},t) + \vec{d}.\vec{\nabla}U_e(\vec{R},t)$$

$$= \sum_\alpha \frac{\vec{P}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} - \frac{Q}{M}\vec{\mathbb{P}}.\vec{A}_e(\vec{R},t) + \frac{Q^2}{2M}\vec{A}_e^{\,2}(\vec{R},t) + V_{Coul} + Q\,U_e(\vec{R},t) + \vec{d}.\vec{\nabla}U_e(\vec{R},t)$$

$\vec{\mathbb{P}} = \sum_\alpha \vec{P}_\alpha$: Impulsion du centre de masse

Calcul de $i\hbar\frac{dT(t)}{dt}T^+(t) = \vec{d}.\dot{\vec{A}}_e(\vec{R},t)$

Récapitulation

$$H^{(2)} = \sum_\alpha \frac{\vec{P}_\alpha^{\,2}}{2m_\alpha} + V_{Coul} + \overbrace{\vec{d}.\left[\vec{\nabla}U_e(\vec{R},t) + \dot{\vec{A}}_e(\vec{R},t)\right]}^{-\vec{d}.\vec{E}_e(\vec{R},t)} +$$

$$\underbrace{-\frac{Q}{M}\vec{\mathbb{P}}.\vec{A}_e(\vec{R},t) + \frac{Q^2}{2M}\vec{A}_e^{\,2}(\vec{R},t) + Q\,U_e(\vec{R},t)}_{\text{Termes nouveaux}}$$

Discussion physique

- Les champs et potentiels sont évalués en $\vec{R}$.
- Les termes nouveaux décrivent l'interaction avec les potentiels extérieurs $\vec{A}_e$ et U_e d'une particule fictive de masse M, de charge Q, de position $\vec{R}$, d'impulsion $\vec{\mathbb{P}}$